

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE GÁS EM REDE
PARA ESCOAMENTOS MONOFÁSICOS E BIFÁSICOS**

**TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**

LUÍS ORLANDO EMERICH DOS SANTOS

FLORIANÓPOLIS, NOVEMBRO DE 2000

**DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE GÁS EM REDE
PARA ESCOAMENTOS MONOFÁSICOS E BIFÁSICOS**

LUÍS ORLANDO EMERICH DOS SANTOS

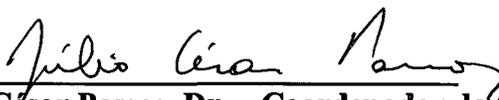
ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

DOUTOR EM ENGENHARIA

**ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA E APROVADA EM SUA
FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**



Prof. Paulo César Philippi, Dr. – Orientador

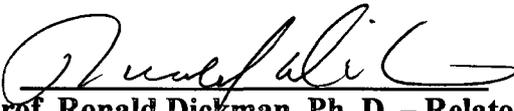


Prof. Júlio César Passos, Dr. – Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA



Prof. Paulo César Philippi, Dr. – Presidente



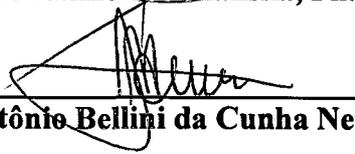
Prof. Ronald Dickman, Ph. D. – Relator



Prof. Aristeu da Silveira Neto, Dr.



Prof. Clóvis Raimundo Maliska, Ph. D.



Prof. José Antônio Bellini da Cunha Neto, Dr.

BIOGRAFIA DO AUTOR

Nascido em 25 de abril de 1969, na cidade de Martinópolis no interior de São Paulo, Luís Orlando Emerich dos Santos, ingressou na Universidade Federal de Santa Catarina em 1987, no curso de engenharia elétrica. Graduado em engenharia elétrica no ano de 1992, iniciou neste mesmo ano o curso de mestrado em física que foi concluído em 1994 com a apresentação de uma dissertação na área de física teórica. Após um período de dois anos afastado das atividades acadêmicas iniciou em 1996 o curso de doutorado em engenharia mecânica que conclui com a apresentação desta tese.

AGRADECIMENTOS

A Paulo César Philippi pela orientação.

Aos membros da banca, Ronald Dickman, Aristeu da Silveira Neto, Clóvis R. Maliska, José Antônio da Cunha Neto e Paulo C. Phillipi pela análise do trabalho e pelas sugestões apresentadas.

Aos colegas do LMPT, em especial a Marcus C. Damiani, Luiz Adolfo Hegele Júnior e Paulo César Facin pelo auxílio, mas também a André D. Bueno, Celso P. Fernandes, José A. Bellini da Cunha Neto e a todos aqueles cujos nomes não citarei (pois sempre faltaria alguém por citar) mas que de alguma forma ajudaram na execução deste trabalho.

A Fábio S. Magnani por ter me apresentado ao LMPT.

Ao CNPq pelo suporte financeiro, a UFSC pela minha formação acadêmica.

SUMÁRIO

| | |
|--|------|
| LISTA DE FIGURAS | viii |
| SIMBOLOGIA | xi |
| RESUMO | xv |
| ABSTRACT | xvi |
| | |
| CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1 – Breve histórico dos modelos discretos | 4 |
| | |
| CAPÍTULO 2 – MODELOS BOOLEANOS: DINÂMICA MICROSCÓPICA | 7 |
| 2.1 – Colisão e propagação | 7 |
| 2.2 – O operador de colisão | 11 |
| 2.3 – Modelos 2D e 3D | 13 |
| | |
| CAPÍTULO 3 – MODELOS BOOLEANOS: DINÂMICA MACROSCÓPICA | 19 |
| 3.1 - Balanço Semi-Detalhado, Conservação da Energia e Teorema H | 20 |
| 3.2 - Equação de Boltzmann para gases em rede | 22 |
| 3.3 - Distribuições de Equilíbrio | 23 |
| 3.4 - Equilíbrio para baixas velocidades | 25 |
| 3.5 - Leis de Conservação | 28 |
| 3.6 - Equação de Euler | 31 |
| 3.7 - Método de Chapman-Enskog | 33 |
| 3.8 - Equação de Navier-Stokes | 39 |

| | |
|---|-----|
| CAPÍTULO 4 - MODELO DE REDE BGK | 41 |
| 4.1 – Apresentação do método | 41 |
| 4.2 - Distribuições de <i>Pseudo-equilíbrio</i> | 42 |
| 4.3 - Equações macroscópicas | 45 |
| | |
| CAPÍTULO 5 – IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS | 48 |
| 5.1 – Modelos booleanos | 48 |
| 5.2 – Modelo de redeBGK | 53 |
| 5.3 – Fatores de escala e a passagem para variáveis físicas | 54 |
| 5.4 – Resultados utilizando o modelo booleano | 50 |
| 5.5 – Resultados utilizando o modelo de rede BGK | 60 |
| | |
| CAPÍTULO 6 - MODELOS DE GÁS EM REDE PARA FLUIDOS IMISCÍVEIS | 66 |
| 6.1 – escoamentos de fluidos imiscíveis | 66 |
| 6.2 – Modelo proposto por Rothman e Keller | 68 |
| 6.3– Modelo proposto por Chen, Doolen, Eggert, Grunau e Loh | 72 |
| 6.4 – Modelo de gás em rede com mediadores | 77 |
| | |
| CAPÍTULO 7 - MODELO COM MEDIADORES – RESULTADOS | 87 |
| | |
| CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES | 108 |
| | |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 110 |

| | |
|------------|-----|
| APÊNDICE A | 116 |
| APÊNDICE B | 118 |
| APÊNDICE C | 134 |
| APÊNDICE D | 147 |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 1 – Modelo FHP (rede hexagonal) | 8 |
| Figura 2 – Etapa de colisão | 9 |
| Figura 3 – Etapa de propagação | 9 |
| Figura 4 – Exemplo de colisão | 11 |
| Figura 5 – Modelo HPP (rede quadrada) | 13 |
| Figura 6 – Modelo FCHC | 15 |
| Figura 7 – Estados ligados por colisão no modelo FHP | 21 |
| Figura 8 – Condição de contorno próximo a uma parede | 49 |
| Figura 9 – Sítios onde são impostas as condições de entrada e saída | 50 |
| Figura 10 – Imposição de condições periódicas de contorno | 51 |
| Figura 11 – Acréscimo de quantidade de movimento | 51 |
| Figura 12 – Perfil parabólico de velocidades (Modelo Booleano) | 54 |
| Figura 13 – Escoamento em meio poroso com condições periódicas de contorno | 56 |
| Figura 14 – Sítio cercado por sólido no modelo HPP | 56 |
| Figura 15 – Um passo na evolução de um sítio cercado por sólido | 57 |
| Figura 16 – Campo de velocidades em um canal com rugosidades. | 58 |
| Figura 17 - Escoamento em um canal com rugosidades | 59 |
| Figura 18 – Perfil parabólico de velocidades (modelo de rede BGK) | 61 |
| Figura 19 – Cavidade quadrada Reynolds 100 | 61 |
| Figura 20 – Cavidade quadrada Reynolds 400 | 62 |
| Figura 21 – Cavidade quadrada Reynolds 1000 | 62 |
| Figura 22 – Escoamento ao redor de um cilindro 3400 passos | 63 |

| | |
|---|----|
| Figura 23 – Escoamento ao redor de um cilindro 6000 passos | 63 |
| Figura 24 – Escoamento ao redor de um cilindro 7900 passos | 64 |
| Figura 25 – Escoamento ao redor de um cilindro 9100 passos | 64 |
| Figura 26 – Comparação entre um escoamento simulado e uma fotografia | 65 |
| Figura 27 – Separação de fases no modelo proposto por Rothman e Keller | 71 |
| Figura 28 – Lei de Laplace no modelo proposto por Rothman e Keller | 72 |
| Figura 29 – Separação de fases no modelo proposto por Chen et al. | 75 |
| Figura 30 – Lei de Laplace no modelo proposto por Chen et al. | 76 |
| Figura 31 – Perfil de pressão de uma bolha no modelo de Chen et al. | 76 |
| Figura 32 – Colisão no modelo com mediadores | 78 |
| Figura 33 – Interferência dos mediadores | 79 |
| Figura 34 – Separação de fases no modelo com mediadores | 81 |
| Figura 35 – Lei de Laplace no modelo com mediadores | 82 |
| Figura 36 – Perfil de densidade uma de bolha no modelo com mediadores | 83 |
| Figura 37 – Variação da quantidade de movimento no modelo com mediadores | 84 |
| Figura 38 – Condição inicial na simulação de um bolha a partir de um cubo | 87 |
| Figura 39 – Evolução do cubo após 60 passos | 88 |
| Figura 40 – Evolução do cubo após 120 passos | 88 |
| Figura 41 – Evolução do cubo após 240 passos | 89 |
| Figura 42 – Evolução do cubo após 1200 passos | 89 |
| Figura 43 – Evolução do cubo após 6000 passos | 90 |
| Figura 44 – Simulação de ângulo de contato (vermelho molhante) | 91 |
| Figura 45 – Simulação de ângulo de contato (vermelho não-molhante) | 91 |
| Figura 46 – Ascensão de um fluido molhante em contato com uma parede | 92 |

| | |
|---|-----|
| Figura 47 – Comparação da ascensão simulada com previsão teórica | 92 |
| Figura 48 – Ascensão capilar: comparação entre simulação e previsão teórica | 93 |
| Figura 49 – Ascensão capilar após 400, 800 e 1200 passos | 93 |
| Figura 50 – Ascensão capilar após 1600, 2000 e 2400 passos | 94 |
| Figura 51 – Ascensão capilar após 2800, 3200 e 3600 passos | 94 |
| Figura 52 – Ascensão capilar após 4000, 4400 e 4800 passos | 94 |
| Figura 53 – Ascensão capilar após 5200, 5600 e 6000 passos | 95 |
| Figura 54 – Ascensão capilar após 6400, 6800 e 7200 passos | 95 |
| Figura 55 – Ascensão capilar após 7600, 8000 e 8400 passos | 95 |
| Figura 56 – Ascensão capilar após 8800, 9200 e 9600 passos | 96 |
| Figura 57 – Ascensão capilar após 10000, 10400 e 10800 passos | 96 |
| Figura 58 – Ascensão capilar após 11200, 11400 e 12000 passos | 96 |
| Figura 59 – Invasão de um meio poroso bidimensional | 97 |
| Figura 60 – Separação de fases: 10, 50, 100 e 200 passos | 98 |
| Figura 61 – Separação de fases: 300 e 500 passos | 99 |
| Figura 62 – Coalescência. Condição inicial e após 400 passos | 99 |
| Figura 63 – Coalescência: 600 passos e 800 passos | 100 |
| Figura 64 – Coalescência: 1000 passos e 3600 passos | 100 |
| Figura 65 – Separação de fases com concentração de 30% de vermelhas | 101 |
| Figura 66 – Campo de velocidade em uma interface | 102 |
| Figura 67 – Campo de velocidade em uma interface | 104 |
| Figura 68 – Densidade de partículas em uma bolha | 105 |
| Figura 69 – Campo de velocidade em uma interface | 105 |
| Figura 70 – Simulação da formação de uma gota | 106 |
| Figura 71 – Perfil de uma gota fotografada | 106 |

SIMBOLOGIA

| | |
|-------------|---|
| b_i | indica presença ou ausência de uma partícula azul |
| \bar{c}_i | velocidade das partículas em unidades de rede |
| \bar{c}^* | velocidade da partícula (adimensional) $\bar{c}^* \equiv \bar{c} \frac{t_c}{L}$ |
| \bar{c}_i | velocidade das partículas em unidades físicas |
| D | número de dimensões |
| f_i | indica uma cor para a direção i (no modelo do Chen et al.) |
| \bar{g}_c | gradiente de cor |
| i | indica uma direção na rede |
| K_n | número de Knudsen |
| L | comprimento característico macroscópico |

| | |
|--------------------|---|
| m_i^b | indica a presença de um mediador azul na direção i |
| m_i^r | indica a presença de um mediador vermelho na direção i |
| n_i | indica presença ou ausência de uma partícula com velocidade \bar{c}_i |
| N_i | valor esperado de n_i |
| N_i^{eq} | distribuição de equilíbrio |
| p | pressão |
| $perm(a, b, c, d)$ | indica todas as permutações entre a, b, c e d |
| \bar{q} | fluxo de cor, ou fluxo de partículas coloridas |
| \bar{q}_H | fluxo de buracos coloridos |
| r_i | indica presença ou ausência de uma partícula vermelha |
| s | estado possível de um sítio |
| t | tempo em unidades físicas |

| | |
|-----------------|--|
| t^* | tempo (adimensional) $t^* \equiv \frac{t}{t_c}$ |
| T | tempo na rede (discreto) |
| $\bar{\bar{T}}$ | tensor tensão |
| t_c | tempo característico macroscópico |
| \bar{u} | velocidade em unidades de rede |
| \bar{x} | posição em unidades físicas |
| \bar{x}^* | espaço (adimensional) $\bar{x}^* \equiv \frac{\bar{x}}{L}$ |
| \bar{X} | posição na rede (discreto) |

Símbolos Gregos

| | |
|------------|---|
| ω_i | operador de colisão dos modelos booleanos |
|------------|---|

| | |
|---------------------|---|
| Ω_i | valor esperado do operador de colisão dos modelos booleanos ou operador de colisão do modelo de rede BGK |
| ρ | densidade (número de partículas) |
| δ_x | fator de escala para o espaço |
| δ | fator de escala para o tempo |
| \bar{v} | velocidade em unidades físicas |
| $\Pi_{\alpha\beta}$ | tensor densidade de fluxo de quantidade de movimento |
| ν_1 | primeiro coeficiente de viscosidade em unidades físicas |
| ν_2 | segundo coeficiente de viscosidade em unidades físicas |
| σ | tensão superficial |
| ξ_i | operador que indica a interferência dos mediadores |

RESUMO

Este trabalho divide-se em duas partes, na primeira parte é apresentado um método para determinação de permeabilidade intrínseca baseado em modelos de gás em rede. Mostra-se que estes modelos possuem um comportamento que pode ser descrito pelas equações de Navier-Stokes para baixo número de Mach. O método foi utilizado para determinação de permeabilidade de rochas de reservatório petrolíferos e os resultados comparados com dados experimentais. Também na primeira parte é apresentado o modelo de rede BGK (Lattice Boltzmann). Baseado na equação de Boltzmann este método permite a integração numérica da equação de Navier-Stokes. São apresentados resultados para escoamentos em uma cavidade quadrada e também a formação das esteiras de vórtices de von-Karman.

Na segunda parte, é proposto um novo modelo para a simulação de fluidos imiscíveis baseado na idéia de um campo de mediadores que simulam interações a longa distância utilizando regras locais. Este modelo permite, além disso, o controle da tensão interfacial e da espessura da interface. A dinâmica do modelo é descrita e são apresentados resultados de simulações de diversos casos, incluindo a verificação da lei de Laplace, o fenômeno de coalescência, interações de pares de fluidos molhante/não-molhante com superfícies sólidas e a formação de uma gota sob a ação da gravidade. Estes resultados são comparados com os dados disponíveis.

ABSTRACT

In its first part, this work presents a method for predicting intrinsic permeability of porous media based on Lattice Gas Cellular Automata (LGA) methods. It is shown that these models evolve in agreement with Navier-Stokes equation for low Mach numbers. The method is used to simulate flows through several Brazilian reservoir petroleum rocks, leading to intrinsic permeability predictions that are compared with experimental results. Also in the first part, Boltzmann method (LB) is presented, based on Boltzmann relaxation equation. LB methods were recently developed for the numerical integration of the Navier-Stokes equation. Results are presented for the lid-driven problem and for von-Karman vortex flow.

In the second part, a new lattice gas model based on field mediators is proposed for simulating the flow of immiscible fluids. Present field mediators simulate long-range action, using, only, local rules. In addition, model enables to *control* interfacial tension and transition thickness. Model's microdynamics is fully described and simulation results are presented for several sample case studies, including the verification of Laplace's law, coalescence phenomenon, interaction of a pair of wetting/non-wetting fluids with solid surfaces and droplet formation under the action of gravity. These results are compared with available data.

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Este trabalho tem por objetivo a apresentação dos modelos de gás em rede utilizados em simulações de escoamentos de fluidos a baixo número de Reynolds. É discutida a utilização dos modelos e são apresentados resultados de simulações. Os modelos de gás em rede para fluidos imiscíveis são, também, apresentados e discutidos, por fim é proposto um novo modelo de gás em rede para este tipo de escoamento. Também é apresentado e discutido neste trabalho o modelo de rede BGK (lattice-BGK, ou lattice-Boltzmann method), um método numérico de simulação da equação de Navier-Stokes desenvolvido a partir dos modelos de gás em rede. Não serão abordados modelos desenvolvidos com o objetivo de permitir simulações de escoamentos a alto número de Reynolds [Chen et al.1997], [Boghosian et al. 1997].

O termo *modelos booleanos* será, freqüentemente, utilizado quando se deseja destacar que não se pretende fazer referência ao modelo de rede BGK. A razão de se utilizar este termo ficará evidente mais adiante.

Inicialmente pode-se caracterizar os modelos de gás em rede como fazendo parte de uma classe mais ampla de modelos que são denominados autômatos celulares. Estes, por sua vez, são idealizações matemáticas de sistemas físicos nos quais todas as grandezas físicas (inclusive espaço e tempo) podem assumir somente um número finito de valores [Wolfram 1984]. A simulação de um sistema físico qualquer com a utilização de autômatos celulares é, em princípio, fundamentalmente distinta das simulações numéricas normalmente realizadas, estando, em muitos aspectos, mais próxima da computação analógica.

As simulações realizadas em computadores analógicos eram realizadas através da idealização e montagem (através de arranjos de capacitores, indutores e resistores) de um sistema físico cuja evolução fosse descrita por equações análogas aos sistemas que fosse o desejo

simular. Isto é bastante diferente das simulações numéricas rotineiramente realizadas em computadores digitais. Nestas, parte-se de uma descrição de um sistema físico, normalmente através de equações diferenciais, e utilizando-se de técnicas numéricas procura-se a solução destas equações para o caso que se deseja simular.

A utilização de autômatos celulares para simulação de sistemas físicos, inicia-se com a *criação* de um sistema idealizado análogo ao que se deseja simular e cujas variáveis são discretas e só podem assumir um número finito de valores. Este sistema idealizado, entretanto, deve possuir as características essenciais do sistema físico, de modo a ser possível a analogia entre os dois. O sistema idealizado é utilizado nas simulações, e a partir do seu comportamento procura-se deduzir, por analogia, o comportamento do sistema real.

Os modelos de gás em rede são os autômatos celulares utilizados na simulação de dinâmica dos fluidos. Nestes modelos um fluido é um conjunto de partículas que habitam um espaço discreto (os sítios de uma rede), possuindo um conjunto finito de velocidades possíveis, saltando de um sítio a outro em intervalos discretos de tempo e colidindo entre si. Um sistema assim idealizado, sob certas condições, é governado pelas mesmas equações que governam o comportamento de um fluido real, sendo portanto possível sua utilização para a simulação do comportamento deste. O fato de um sistema tão idealizado poder ser representado pelas mesmas equações de um fluido real pode parecer estranho, entretanto, deve-se levar em consideração que a forma dessas equações macroscópicas são relativamente insensíveis aos detalhes da dinâmica microscópica (embora não o sejam os coeficientes de transporte) [Wolfram 1986]. Aparentemente, o que é fundamental para o comportamento macroscópico adequado (isto é de acordo com a equação de Navier-Stokes) é que a dinâmica microscópica respeite os princípios de conservação (conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia) e, além disso, é importante que esta dinâmica, quando vista numa escala suficientemente grande seja isotrópica. Assim, o princípio que norteia a utilização dos modelos de gás em rede para simulações de

dinâmica dos fluidos é a tentativa de se reproduzir as características essenciais na dinâmica microscópica responsáveis por um comportamento macroscópico que possa ser descrito pelas equações de Navier-Stokes. Isto pode ser encarado sob dois aspectos: computacional e físico. No aspecto computacional a busca das características essenciais deve resultar em sistemas simples (onde somente as características essenciais estariam presentes) o que, em princípio, implicaria em eficiência computacional, esta eficiência computacional, entretanto, somente pode ser estabelecida a partir de comparações com simulações de dinâmica dos fluidos realizadas utilizando-se métodos de discretização das equações de Navier-Stokes. Até o presente os modelos de gás em rede têm se mostrado especialmente úteis em simulações de escoamentos em geometrias complexas e bastante adequados ao uso de computação paralela. Sob o ponto de vista físico os modelos de gás em rede servem como um laboratório onde é possível separar e analisar as características microscópicas responsáveis pelos comportamentos apresentados de diversos sistemas normalmente tratados como contínuos. Portanto, uso de modelos de gás em rede permite que se investigue a relação entre comportamento microscópico e o resultante comportamento macroscópico.

Os capítulos seguintes podem ser divididos em dois grupos principais: nos capítulos 2, 3, 4, 5 trata-se somente com modelos destinados à simulação de escoamentos monofásicos; nos capítulos 6 e 7 são apresentados os modelos para escoamentos de fluidos imiscíveis. Mais especificamente, no capítulo 2 apresenta-se a dinâmica microscópica dos modelos, no capítulo 3 é deduzido o comportamento macroscópico gerado por esta dinâmica, no capítulo 4 é apresentado o modelo de rede BGK, estes capítulos compõem uma revisão abrangente da utilização dos modelos de gás em rede e do modelo de rede BGK para escoamentos monofásicos, não apresentando, entretanto, desenvolvimentos inéditos. No capítulo 5 são apresentados resultados (todos inéditos) obtidos com a utilização dos modelos apresentados, destaca-se neste capítulo uma modificação no modo de se realizar a determinação de

permeabilidade intrínseca (com a inclusão de regiões de bombeamento) que resultou em ótimos resultados. No capítulo 6 são apresentados modelos utilizados para a simulação de fluidos imiscíveis, propõe-se também um novo modelo cujas características são apresentadas e discutidas. O capítulo 7 é dedicado à apresentação de resultados obtidos com utilização do modelo proposto neste trabalho, comprovando assim sua eficiência e viabilidade. Conclui-se no capítulo 8 com uma análise de todo o trabalho. No restante desta introdução é apresentada uma breve descrição da história dos modelos de gás em rede.

1.1 – Breve histórico dos modelos discretos

Os modelos abordados neste estudo tem a sua origem mais remota na Teoria Cinética dos Gases, considerando este fato, será apresentado nesta seção um breve histórico desta teoria até o surgimento dos modelos de gás em rede.

Atribui-se a Daniel Bernoulli (1738) o primeiro trabalho em Teoria Cinética dos Gases, a dedução da Lei dos Gases utilizando o “modelo de bolas de bilhar”, ou seja, considerando um gás como sendo composto por esferas rígidas sujeitas a colisões entre si e com as paredes do recipiente que contém o gás. O trabalho pioneiro de Bernoulli, entretanto, não foi suficiente para instigar os cientistas da época e a Teoria Cinética só veio a ter avanços significativos mais de um século depois, especialmente a partir dos trabalhos de Rudolf Clausius e James C. Maxwell.

Em 1859 Clausius introduz a idéia de livre caminho médio das moléculas e, com base nesta idéia, teorias de difusão, viscosidade e condução de calor são desenvolvidas. Os trabalhos de Clausius servem de estímulo para Maxwell que em 1860 deriva a lei de distribuição das velocidades das moléculas de um gás. Alguns anos depois (1867) Maxwell apresenta a equação que ficou conhecida como equação de transporte de Maxwell.

A partir de 1868 Ludwig Boltzmann torna-se o principal personagem no desenvolvimento da Teoria Cinética. Ele generaliza a lei de distribuição de Maxwell para gases poliatômicos incluindo a presença de forças externas, distribuição esta que ficou conhecida como distribuição de Maxwell-Boltzmann. Em 1872 Boltzmann apresenta o teorema H que permite a compreensão da tendência ao equilíbrio apresentada por sistemas macroscópicos, e fornece uma conexão entre o enfoque microscópico da Teoria Cinética e o enfoque macroscópico dado pela Termodinâmica. A equação de transporte de Boltzmann, importantíssima para os futuros desenvolvimentos da Teoria Cinética, foi deduzida em 1876. Segue-se então uma reação crítica à abordagem microscópica da matéria especialmente devida a Mach e Ostwald.

A partir deste ponto a Teoria Cinética segue dividida em duas correntes: a Teoria Cinética dos Gases e a Mecânica Estatística. A primeira voltada ao estudo das propriedades macroscópicas dos gases, especialmente em estados de não equilíbrio, e tendo como base as equações de transporte de Maxwell e Boltzmann; e a segunda menos restrita com relação ao campo de estudos mas dedicada especialmente aos estados de equilíbrio, e tendo por base a Teoria dos Ensembles.

Um avanço importante na teoria ocorre a partir dos trabalhos desenvolvidos por S. Chapman (1916) e D. Enskog (1917) que desenvolvem teorias de transporte a partir das equações de transporte de Maxwell e Boltzmann. O primeiro passo em direção a utilização de variáveis discretas na Teoria Cinética foi dado por I.E. Broadwell [Broadwell 1964] que, na década de sessenta, propôs um modelo de um gás com somente seis velocidades, ao longo das direções positivas e negativas dos eixos de um sistema de referência cartesiano ortogonal, dando início assim ao enfoque discreto da teoria cinética, que ainda hoje, é bastante utilizado no estudo dos gases rarefeitos.

Também foi na década de sessenta, a partir das idéias de S. Ulam e J. von Neumann, que surgiu o conceito de autômatos celulares. O primeiro autômato celular idealizado para simulação

de dinâmica dos fluidos, foi introduzido na década de setenta por J. Hardy, O. de Pazzis e Y. Pomeau [Hardy et al. 1973, 1976]. Este modelo, que ficou conhecido como HPP, é composto por uma rede quadrada e por partículas que habitam os sítios da rede e saltam entre estes sítios a cada passagem de tempo (também discreto).

Na primeira metade da década de oitenta diversos artigos publicados por S. Wolfram estudando o comportamento de autômatos celulares simples tiveram grande influência. Em vários desses artigos é sugerido o uso de autômatos celulares para simulação de dinâmica dos fluidos [Wolfram 1983, 1984, 1986]. O passo crucial nessa direção foi dado por U. Frisch, B. Hasslacher e Y. Pomeau que em 1986 propuseram um modelo de gás em uma rede hexagonal e mostraram que tal modelo obedece macroscopicamente as equações de Navier-Stokes em seu limite para escoamentos incompressíveis [Frisch et al. 1986][Frisch et al. 1987]. A partir daí surgiram diversos outros modelos: para escoamentos tridimensionais, para fluxos bifásicos, modelos com transição de fase, modelos utilizando a equação de Boltzmann, etc.

CAPÍTULO 2 – MODELOS BOOLEANOS: DINÂMICA MICROSCÓPICA

Neste capítulo é abordada a dinâmica microscópica dos modelos de gás em rede, que é o nível mais detalhado de descrição possível. Essa dinâmica é descrita em termos matemáticos que permitirão, no capítulo seguinte, a análise do comportamento dos modelos. Também faz parte deste capítulo (seção 2.3) uma breve análise dos modelos em duas e três dimensões e dos espaços discretos onde se desenvolve a dinâmica dos modelos: as redes.

2.1 – Colisão e Propagação

Modelos de gás em rede são compostos basicamente de um conjunto de partículas que podem ocupar somente determinadas posições no espaço: os vértices de uma rede. As partículas podem mover-se na rede saltando de um sítio para um sítio vizinho num passo de tempo, como o espaço percorrido pela partícula é discreto e também o tempo que ela leva para percorrer este espaço, tem-se apenas um conjunto discreto de velocidades. Além disso, as partículas nos sítios são, a cada passo, reordenadas segundo regras que simulam colisões entre partículas e que são características de cada modelo mas, em todos os casos, conservam o número de partículas e a quantidade de movimento de cada sítio. Pode-se dividir, portanto, cada passo da evolução de um modelo de gás em rede em duas etapas que serão chamadas de colisão e propagação. Colisão é a etapa na qual as partículas presentes nos sítios são reordenadas conservando-se o número de partículas e a quantidade de movimento. Na etapa de propagação as partículas saltam de um sítio a outro segundo as direções das suas velocidades. Para clarear estas idéias, e introduzir outras, será utilizado como exemplo um modelo simples mas representativo, o modelo conhecido como FHP, representado na figura 1.

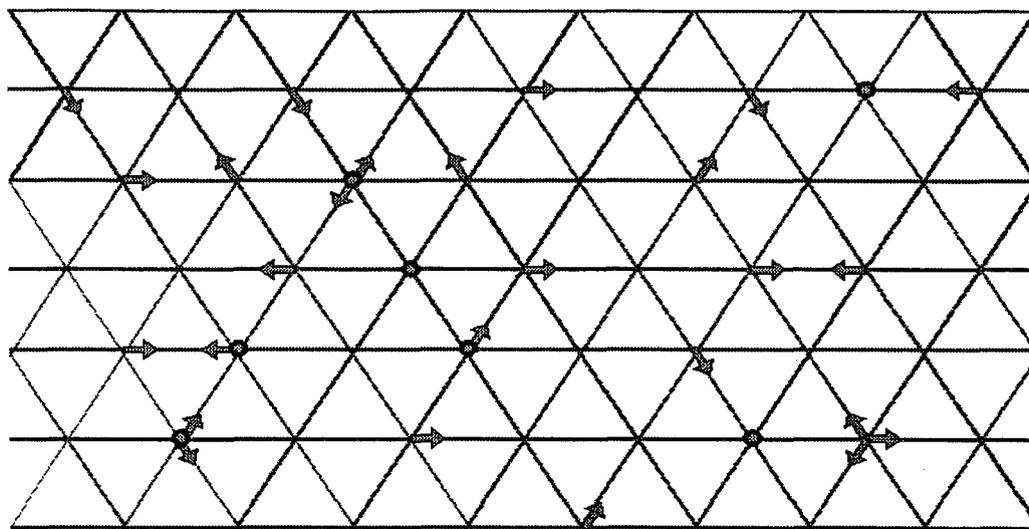


Figura 1 – Modelo FHP

O modelo FHP, é composto de uma rede hexagonal. Para cada uma das seis direções de um sítio é permitido a presença de no máximo uma partícula, representada na figura 1 através de uma seta. Outro ponto importante: é possível a presença de partículas em repouso nos sítios, representadas na figura por círculos. Conforme o modelo pode-se ter ou não partículas em repouso, ou ainda pode-se permitir a presença de mais de uma partícula em repouso por sítio. A razão de se limitar o número de partículas nos sítios é a utilização de variáveis booleanas para representar a presença ou ausência de uma partícula, e com isso reduzir a um mínimo o consumo de memória e tempo computacional requerido nas simulações.

As regras de colisão podem ser probabilísticas ou determinísticas, e são sempre escolhidas de modo a conservar o número de partículas e a quantidade de movimento em cada sítio. Na seqüência, figura 2, é apresentado um exemplo de colisão no modelo FHP.

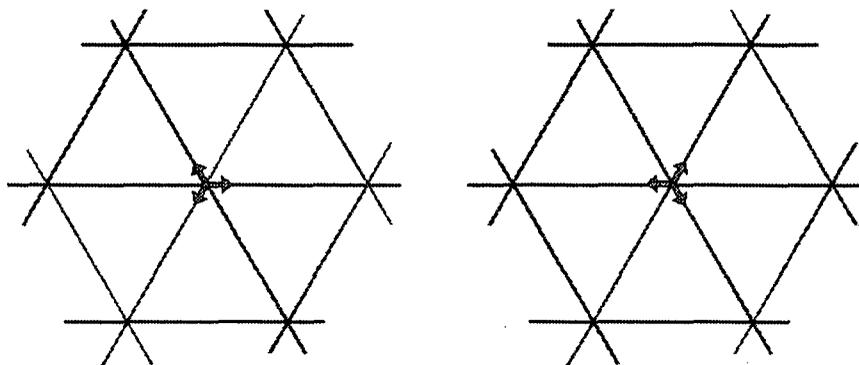


Figura 2 – Etapa de colisão

Após a etapa de colisão segue-se a etapa de propagação, quando cada partícula salta para o sítio mais próximo na direção da sua velocidade. Um sítio como o apresentado na figura 2 teria a etapa propagação como é apresentada na figura 3.

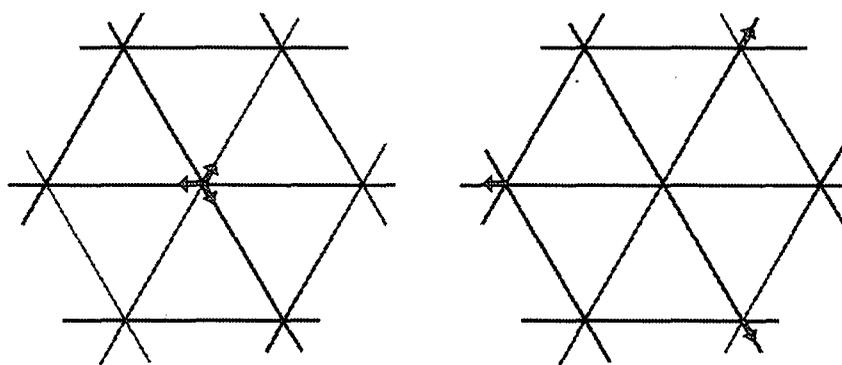


Figura 3 – Etapa de propagação

Foi visto um passo da evolução de um modelo de gás em rede. Será agora estudado com mais detalhe como é a dinâmica microscópica de um modelo. Será considerado para este estudo uma rede onde em cada sítio temos um conjunto de no máximo b partículas (ou b graus de liberdade), como foi visto a presença ou ausência de uma partícula num sítio pode ser representada por uma variável booleana, (zero ou um). Para cada valor do parâmetro discreto tempo, T , escrevemos os valores das variáveis booleanas (representando a presença ou ausência

das partículas) como $n_i(\vec{X}, T)$, onde i indica uma velocidade ($i = 1, \dots, b$), e \vec{X} representa a posição na rede. Para cada $i \in \{1, \dots, b\}$ há um vetor \vec{c}_i tal que o ponto $\vec{X} + \vec{c}_i$ também é pertencente a rede. No decorrer de todo o texto um vetor no plano ou no espaço será indicado pela presença de uma seta sobre a letra, e será utilizado negrito para representar um vetor com b elementos, um para cada grau de liberdade do sítio.

Define-se o conjunto S como o conjunto dos estados possíveis de um sítio qualquer \vec{X} no tempo T , obviamente, S deve conter 2^b elementos. Um estado $s \in S$ pode ser escrito como um vetor $s = (s_1, s_2, \dots, s_b)$, onde $s_i = 1$ indica que existe uma partícula com velocidade \vec{c}_i em um sítio que esteja no estado s , e $s_i = 0$ indica que não há partícula com velocidade \vec{c}_i em um sítio no estado s .

A evolução da rede, como foi comentado, pode ser dividida em duas etapas. I - colisão: quando a configuração das partículas de um sítio são alterados de acordo com regras que são características uma rede. II - propagação: quando as partículas são movidas do ponto \vec{X} para os pontos $\vec{X} + \vec{c}_i$. Esta evolução pode ser descrita pela equação:

$$n_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = n_i(\vec{X}, T) + \omega_i(\mathbf{n}(\vec{X}, T)), \quad (2.1.1)$$

onde ω é um operador representando a colisão e utilizamos negrito para indicar que ω depende de todos os graus de liberdade do ponto \vec{X} ,

$$\omega_i(\mathbf{n}) = \omega_i(n_0, n_1, \dots, n_b). \quad (2.1.2)$$

Na equação (2.1.1), temos inicialmente a variável booleana $n_i(\vec{X}, T)$, esta é, então, alterada devido à ação do operador de colisão $\omega_i(\mathbf{n}(\vec{X}, T))$, que depende de todos os graus de liberdade do ponto \vec{X} . O resultado é, em seguida, propagado para o ponto $\vec{X} + \vec{c}_i$, e assim é atualizado em um passo o sistema.

2.2 - O operador de colisão

Para um modelo determinístico o processo de colisão pode ser inteiramente descrito por uma matriz de transição booleana $2^b \times 2^b$, cujo elemento $\alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ é igual a 1 se, e somente se, as partículas de um sítio no estado \mathbf{s} colidem de modo a levar este sítio ao estado \mathbf{s}' . Como para cada estado antes da colisão temos um estado após a colisão:

$$\sum_{\mathbf{s}'} \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = 1. \quad (2.2.1)$$

A grande maioria dos modelos de gás em rede, entretanto, são não-determinísticos. Neste caso consideraremos que para cada colisão a variável booleana $\alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ será tal que

$$\langle \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') \rangle = A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') \quad \forall \mathbf{s}, \mathbf{s}' \quad (2.2.2)$$

onde $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ representa a probabilidade de transição do estado \mathbf{s} para o estado \mathbf{s}' . É importante notar que, como $\alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ é uma variável booleana, a equação (2.2.1) indica que para cada realização de $\alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ somente um estado \mathbf{s}' é obtido.

Definimos a função delta de Kronecker para variáveis booleanas:

$$\delta(y, z) = y^z (1 - y)^{1-z}. \quad (2.2.2)$$

O produto $\prod_{j=1}^b \delta(n_j, s_j)$ é igual a 1 em um ponto da rede se, e somente se, este ponto esta

no estado \mathbf{s} . Pode-se, a partir disso, escrever o operador de colisão na seguinte forma:

$$\omega_i(\mathbf{n}(\vec{X}, T)) = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b \delta(n_j, s_j). \quad (2.2.4)$$

O fator $\prod_{j=1}^b \delta(n_j, s_j)$ informa em qual estado se encontra o ponto \vec{X} , pois somente

quando $(n_1, n_2, \dots, n_b) = (s_1, s_2, \dots, s_b)$ este fator será diferente de zero, como estamos somando sobre todos os estados \mathbf{s} sempre haverá um estado \mathbf{s} (e somente um) no qual este fator será diferente de

zero. O fator $\alpha(s \rightarrow s')$ indica para qual estado s' o estado s será levado. Tendo sido definida uma transição do estado s para o estado s' o fator $(s'_i - s_i)$ faz com que:

$$\omega_i = 0 \text{ se } s_i = s'_i,$$

$$\omega_i = 1 \text{ se } s_i = 0 \text{ e } s'_i = 1,$$

$$\omega_i = -1 \text{ se } s_i = 1 \text{ e } s'_i = 0.$$

Para exemplificar estas idéias, será utilizado o modelo FHP. Será visto como ficaria o operador ω_i para a seguinte colisão:

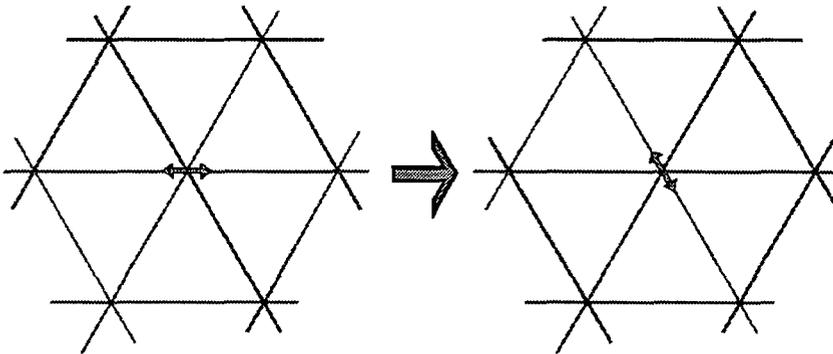


Figura 4 – Exemplo de colisão

O estado do sítio antes da colisão pode ser representado pelo vetor $(1,0,0,1,0,0)$, e o estado pós-colisional s' pelo vetor $(0,0,1,0,0,1)$, neste caso $\alpha(s \rightarrow s') = 1$ para s e s' como mostrado na figura 4. Tem-se então, $\omega_i = s'_i - s_i$, e portanto $\omega_1 = -1$, $\omega_2 = 0$, $\omega_3 = 1$, $\omega_4 = -1$, $\omega_5 = 0$ e $\omega_6 = -1$. Deve-se observar que as somas que aparecem no operador de colisão, sobre s e s' , surgem do fato de que este operador não representa apenas a situação descrita acima mas todas as configurações e transições provocadas por colisões.

É importante que, durante a etapa de colisão, a massa e a quantidade de movimento sejam grandezas conservadas. Chamando de n'_i o estado resultante de uma colisão, podemos descrever a conservação de uma grandeza qualquer q através da equação:

$$\sum_i qn'_i = \sum_i qn_i. \quad (2.2.5)$$

Da mesma forma que se impõe a conservação da massa e da quantidade de movimento procura-se fazer com que estes sejam as únicas grandezas conservadas, pois a presença de um excesso de grandezas conservadas pode levar o gás em rede a um comportamento em desacordo com as equações da hidrodinâmica

Neste trabalho os modelos utilizados (como será visto no capítulo 5) possuem regras de colisão bastante simples: para um estado s qualquer escolhe-se um estado s' com igual probabilidade entre todos os estados que conservem o número de partículas e a quantidade de movimento do estado s . Como será visto mais adiante no capítulo 3, regras assim especificadas trazem consigo a conservação da energia.

2.3 - Modelos 2D e 3D

Os modelos de gás em rede tem em comum, entre outras características, a utilização de espaços discretos, mais especificamente, são utilizadas redes regulares de Bravais. Definições e propriedades redes de Bravais podem ser encontradas em [Rothman & Zaleski 1997], um estudo mais é encontrado em [Coxeter 1977].

O primeiro e mais simples modelo de gás em rede utilizado para escoamentos de fluídos foi o modelo HPP, representado figura 5.

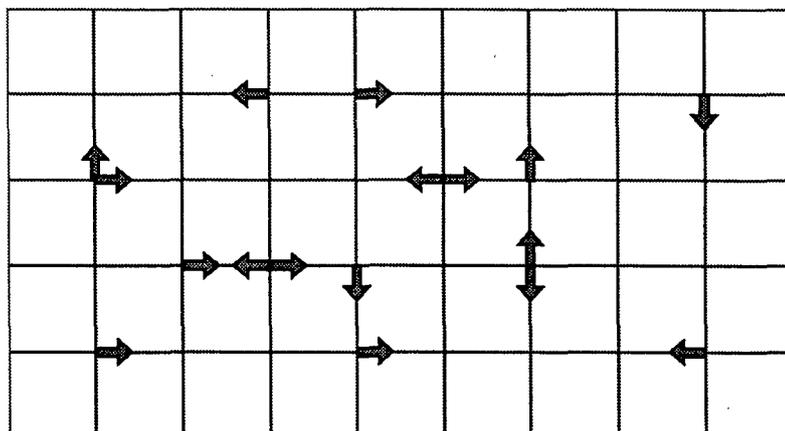


Figura 5 – Modelo HPP

Como mostra a figura 5, este modelo utiliza uma rede quadrada, além disso, não são permitidas partículas em repouso e apenas colisões binárias são permitidas, de modo a garantir a conservação da quantidade de movimento. Este modelo apesar de sua importância histórica não é utilizado em simulações de escoamentos de fluidos pois seu comportamento macroscópico não é isotrópico.

Para simulações em duas dimensões é utilizado o modelo FHP que, como vimos, é construído sobre uma rede hexagonal. A versão mais simples deste modelo não utiliza partículas em repouso. Apesar de sua simplicidade este modelo tem um comportamento macroscópico descrito por equações isotrópicas que se aproximam das equações de Navier-Stokes quando as velocidades são suficientemente baixas (limite subsônico). Normalmente são incluídas uma ou mais partículas em repouso pois, com isso, aumenta-se o número de colisões, reduzindo assim a viscosidade do fluido e, conseqüentemente aumentando o número de Reynolds para as mesmas velocidades.

Nenhuma rede tridimensional possui a simetria necessária para que o modelo construído a partir dessa rede possua equações macroscópicas isotrópicas [Rothman & Zaleski 1997]. Contorna-se este problema utilizando-se a projeção em três dimensões de uma rede quadridimensional conhecida como rede FCHC [d'Humières 1986]. Esta rede é construída a partir dos seguintes *vetores velocidade*:

$$\vec{c}_i = \text{perm}(\pm 1, \pm 1, 0, 0), \quad (2.3.1)$$

onde a notação $\text{perm}(a, b, c, d)$ indica todas as permutações entre a , b , c e d . São seis as possíveis permutações para (2.3.1) e quatro as escolhas possíveis entre os sinais, portanto tem-se um total de vinte e quatro vetores \vec{c}_i .

Pode-se fazer uma correspondência entre os vinte e quatro vetores da rede FCHC e os primeiros e segundos vizinhos de uma rede cúbica. Para isso são utilizadas as três primeiras

dimensões da rede quadridimensional. Tem-se, então, dois tipos de vetores, do primeiro tipo são os doze vetores

$$\vec{u} = perm(\pm 1, \pm 1, 0). \quad (2.3.2)$$

Estes vetores conectam os segundos vizinhos na rede cúbica e possuem módulo $|\vec{c}_i| = \sqrt{2}$. De outro tipo são os vetores

$$\vec{v} = perm(\pm 1, 0, 0). \quad (2.3.3)$$

Estes devem ligar os primeiros vizinhos na rede cúbica. Nota-se que para cada \vec{v} há um par de vetores na rede quadridimensional:

$$\vec{v} = perm(\pm 1, 0, 0, +1) \text{ e } \vec{v} = perm(\pm 1, 0, 0, -1), \quad (2.3.4)$$

isso é equivalente a possibilidade da presença de duas partículas ligando os primeiros vizinhos na rede cúbica. Isto pode ser visto com clareza na figura 6.

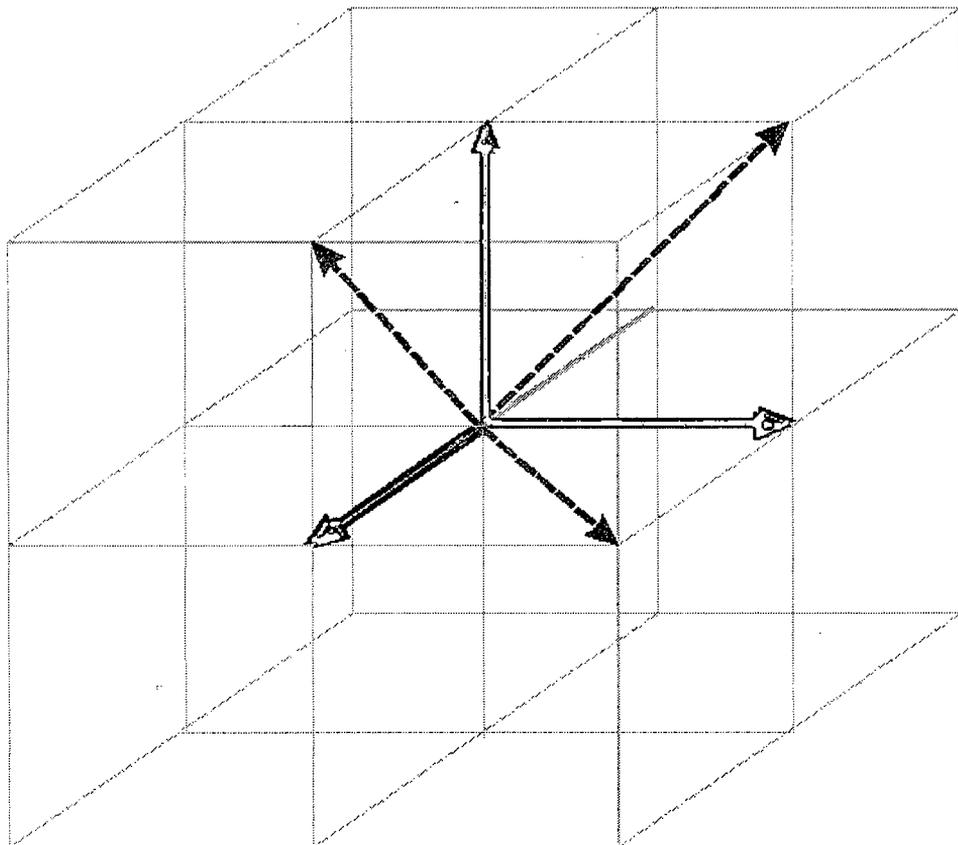


Figura 6 – Modelo FCHC

Na figura 6, temos a projeção na rede cúbica dos vetores $\vec{u} = perm(+1,+1,0)$, em preto, e dos vetores $\vec{v} = (+1,0,0,\pm 1)$, $\vec{v} = (0,+1,0,\pm 1)$ e $\vec{v} = (0,0,+1,\pm 1)$ em azul e vermelho. As regras de colisão no modelo FCHC são escolhidas como nos modelos já vistos, de modo a conservar massa e quantidade de movimento.

A estrutura da rede é essencial no comportamento macroscópico apresentado pelos modelos de gás em rede. Essa influência aparece explicitamente na dedução das equações macroscópicas dos modelos (ver capítulo.3) através de combinações do tipo $\sum_i c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\delta}$, onde os coeficientes α , β , γ e δ representam os índices espaciais. Quando estes tensores não são isotrópicos, também não é isotrópico o comportamento do gás descrito pelas equações macroscópicas.

Portanto, é essencial que o tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \sum_i c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\delta}$, formado a partir de um conjunto de vetores \vec{c}_i que representam as direções da rede, seja um tensor isotrópico e, quando isso acontece, este tensor pode ser escrito [Aris 1962]:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \lambda\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \mu\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \eta\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}. \quad (2.3.5)$$

Pode-se demonstrar a isotropia de qualquer tensor de quarta ordem, simplesmente mostrando que este pode ser colocado na forma (2.3.5), quando isso não é possível o tensor é não isotrópico.

A seguir será demonstrado que o tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ formado com os vetores \vec{c}_i da rede quadrada é um tensor não-isotrópico, e na seqüência é demonstrada a isotropia do tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ para a rede hexagonal. A isotropia do tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ para o caso da rede FCHC é demonstrada no apêndice A.

Os vetores \vec{c}_i da rede quadrada são: $\vec{c}_1 = (1,0)$, $\vec{c}_2 = (0,1)$, $\vec{c}_3 = (-1,0)$ e $\vec{c}_4 = (0,-1)$, onde o primeiro elemento é a componente na direções x e o segundo elemento é a componente na direção y .

O tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ possui dezesseis elementos. Como nenhum dos vetores que formam o tensor possui simultaneamente componentes nas direções x e y , qualquer elemento do tensor que tenha simultaneamente os índices x e y será nulo. Ou, em outras palavras, $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ é diferente de zero, somente quando $\alpha = \beta = \gamma = \delta$. Neste caso, tem-se

$$C_{xxxx}^{(4)} = \sum_i c_{ix} c_{ix} c_{ix} c_{ix} = 2, \quad (2.3.7)$$

$$C_{yyyy}^{(4)} = \sum_i c_{iy} c_{iy} c_{iy} c_{iy} = 2. \quad (2.3.8)$$

Uma tentativa de colocar o tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ na forma dada pela equação (2.3.5) leva as seguintes equações:

$$\lambda + \mu + \eta = 2, \quad (2.3.9)$$

$$\lambda = 0, \mu = 0, \eta = 0. \quad (2.3.10)$$

Conseqüentemente o tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ não pode ser posto na forma (2.3.5), logo é um tensor não-isotrópico.

De forma análoga pode-se demonstrar a isotropia do tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ para a rede hexagonal.

Neste caso os vetores \vec{c}_i são escritos:

$$\vec{c}_1 = (1,0), \quad \vec{c}_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \vec{c}_3 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad (2.3.11)$$

$$\vec{c}_4 = (-1,0), \quad \vec{c}_5 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \text{ e } \vec{c}_6 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right). \quad (2.3.12)$$

Para facilitar os cálculos dos elementos estes são separados em três grupos. Um grupo é composto por elementos com três índices repetidos:

$$C_{xyyy}^{(4)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^3 - \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^3 + \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^3 - \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^3 + \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^3 = 0, \quad (2.3.13)$$

$$C_{yyxy}^{(4)} = C_{yyxy}^{(4)} = C_{yyyx}^{(4)} = C_{yxxx}^{(4)} = C_{xyxx}^{(4)} = C_{xyyx}^{(4)} = C_{xxyx}^{(4)} = C_{xxyx}^{(4)} = 0. \quad (2.3.14)$$

Outro grupo é o composto por elementos com dois índices iguais:

$$C_{xxyy}^{(4)} = \left(\frac{\sqrt{3}}{4} \right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{4} \right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{4} \right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{4} \right)^2 = \frac{3}{4}, \quad (2.3.15)$$

$$C_{yyxx}^{(4)} = C_{xyxy}^{(4)} = C_{yxyx}^{(4)} = C_{xyyx}^{(4)} = C_{yxxy}^{(4)} = \frac{3}{4}. \quad (2.3.16)$$

E o último grupo é composto pelos elementos com todos os índices iguais:

$$C_{xxxx}^{(4)} = 1 + 1 + \left(\frac{1}{2} \right)^4 + \left(\frac{1}{2} \right)^4 + \left(\frac{1}{2} \right)^4 + \left(\frac{1}{2} \right)^4 = \frac{9}{4}, \quad (2.3.17)$$

$$C_{yyyy}^{(4)} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^4 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^4 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^4 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^4 = \frac{9}{4}. \quad (2.3.18)$$

Utilizando novamente a equação (2.3.5) são obtidas as seguintes equações:

$$\lambda + \mu + \eta = \frac{9}{4}, \quad (2.3.19)$$

$$\lambda = \frac{3}{4}, \quad \mu = \frac{3}{4}, \quad \eta = \frac{3}{4}. \quad (2.3.20)$$

E, conseqüentemente, o tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$, para uma rede hexagonal, pode ser escrito:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \frac{3}{4} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}), \quad (2.3.21)$$

o que demonstra que é um tensor isotrópico.

CAPÍTULO 3 – MODELOS BOOLEANOS: DINÂMICA MACROSCÓPICA

Pode-se pensar na descrição de um modelo de gás em rede em três níveis. Num nível mais detalhado, especifica-se os $n_i(\vec{X}, T)$ para todos os pontos da rede e para cada passo de tempo, tem-se desse modo uma descrição completa do sistema. De um modo geral essa descrição é muito mais detalhada do que é necessário, uma descrição menos detalhada é obtida com um conjunto de equações de evolução para os valores médios de $n_i(\vec{X}, T)$; mesmo essa descrição, entretanto, é redundante para muitos propósitos, assim num nível menos detalhado ainda é possível procurarmos por equações para os valores médios das grandezas conservadas (como as equações de Navier-Stokes). Vimos anteriormente uma descrição da dinâmica microscópica dos modelos de gás em rede através de uma equação para a evolução dos $n_i(\vec{X}, T)$, neste capítulo os outros níveis de descrição da dinâmica dos modelos de gás em rede serão abordados.

Na seção 3.1 são descritas algumas características que devem ser impostas às matrizes de transição de modo a garantir a conservação de energia e para que o modelo obedeça à segunda lei da termodinâmica. Na seção 3.2 será vista a equação de Boltzmann para gases em rede, equação esta que descreve a dinâmica dos valores médios de $n_i(\vec{X}, T)$. Na sequência (seções 3.3 e 3.4) são vistas soluções de equilíbrio desta equação. O restante do capítulo é devotado à busca de uma descrição da dinâmica dos modelos através de equações para as grandezas macroscópicas: massa e quantidade de movimento. Deduz-se a equação da conservação da massa na seção 3.5, e, na seção 3.6, a equação da conservação da quantidade de movimento na situação de equilíbrio (Equação de Euler). Nas seções 3.7 e 3.8 utiliza-se o método de Chapman e Enskog para a dedução de equações que descrevem o comportamento macroscópico do gás em rede

quando este está próximo do equilíbrio, obtendo-se assim uma equação de conservação de quantidade de movimento que é análoga à equação de Navier-Stokes.

3.1 – Balanço Semi-Detalhado, Conservação da Energia e Teorema H

Define-se $N_i(\bar{X}, T)$ como uma média dos valores de $n_i(\bar{X}, T)$, realizada num conjunto (*ensemble*) de realizações de modelos de rede idênticos. Na prática, a obtenção de quantidades médias, é realizada pelo cálculo de médias temporais e espaciais na rede, isto pode ser feito baseando-se na hipótese de ergodicidade, em outras palavras, considera-se que durante um certo intervalo de tempo o sistema terá passado muito próximo de todos os estados possíveis.

A função distribuição pode ser escrita, então,

$$N_i(\bar{X}, T) = \langle n_i(\bar{X}, T) \rangle. \quad (3.1.1)$$

E para a matriz de transição temos

$$A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = \langle \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') \rangle. \quad (3.1.2)$$

Nota-se que para um modelo com regras determinísticas $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$, enquanto que para um modelo com regras probabilísticas $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ é um número entre zero e um, representando a probabilidade de transição de \mathbf{s} para \mathbf{s}' .

Ainda para modelos probabilísticos diz-se que um modelo é estatisticamente reversível se este obedece a *condição de balanço detalhado*, isto é, se

$$A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = A(\mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{s}) \quad \forall \mathbf{s}, \mathbf{s}'.$$

A maioria dos modelos, no entanto, obedece a uma condição de reversibilidade menos estrita, imposta através da *condição de balanço semi-detalhado*:

$$\sum_{\mathbf{s}} A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = 1 \quad \forall \mathbf{s}'. \quad (3.1.3)$$

A condição de balanço semi-detalhado é de fundamental importância para que o comportamento macroscópico do gás em rede esteja de acordo com as equações da hidrodinâmica, como será visto no decorrer do capítulo.

Quando se falou sobre as regras de colisão nada foi dito sobre conservação de energia e, à primeira vista, pode-se ter a impressão de que a energia não é conservada. Considere, por exemplo uma colisão entre três partículas com quantidade de movimento total nula no modelo FHP (com uma partícula em repouso). Os estados neste caso são apresentados na figura 7.

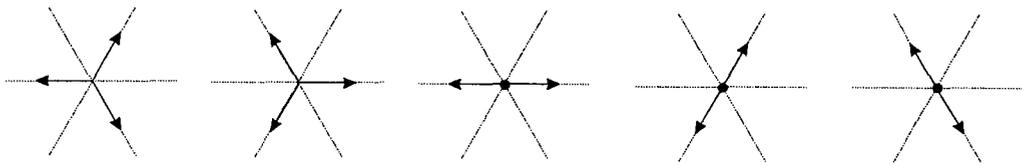


Figura 7 - Estados ligados por colisão no modelo FHP (quantidade de movimento nula)

Qualquer transição entre estes estados conserva massa e quantidade de movimento (e de acordo com as regras utilizadas é, portanto, permitida); entretanto, algumas transições, obviamente, não conservam energia cinética. Um possível modo de encarar o que acontece é associando uma energia interna unitária à cada partícula em repouso. Neste caso, a conservação de energia é uma consequência da conservação massa (esta solução é encontrada em d'Humieres & Lallemand 1987). De qualquer forma, nenhum vínculo relativo à conservação de energia é imposto explicitamente, nem se procura com estes modelos obter uma descrição adequada dos processos de dissipação envolvendo transmissão de calor.

Também para modelos que obedecem ao balanço semi-detalhado é possível mostrar que estes possuem um Teorema H, i.e., existe uma função (associada à entropia) que é função do estado da rede e que nunca é decrescente no tempo. Não será apresentada neste trabalho a demonstração deste teorema, que pode ser encontrada em [Hénon 1987(1)].

Ainda como decorrência do balanço semi-detalhado (além das condições impostas às colisões) demonstra-se que os modelos que obedecem a estas restrições possuem sempre valores positivos de viscosidade [Hénon 1987(2)].

3.2 – Equação de Boltzmann para gases em rede

A equação que descreve a evolução microscópica do modelo é escrita

$$n_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = n_i(\vec{X}, T) + \omega_i(\mathbf{n}(\vec{X}, T)). \quad (3.2.1)$$

Ao se efetuar a média da equação acima com o intuito de obter uma equação para $N_i(\vec{X}, T)$, nota-se que o operador de colisão,

$$\omega_i(\mathbf{n}(\vec{X}, T)) = \sum_{s, s'} \alpha(s \rightarrow s')(s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b \delta(n_j, s_j), \quad (3.2.2)$$

é uma função não linear dos $n_i(\vec{X}, T)$. A média de uma função não linear geralmente não pode ser escrita como uma função das quantidades médias. Considerando-se que os $n_i(X, T)$ são não-correlacionados (hipótese do caos molecular), então pode-se escrever [Wolfram 1986], [Frisch et al. 1987]

$$\langle \omega_i(\mathbf{n}(\vec{X}, T)) \rangle = \Omega_i(\langle \mathbf{n}(\vec{X}, T) \rangle) = \Omega_i(\mathbf{N}(\vec{X}, T)). \quad (3.2.3)$$

Segue daí que

$$\Omega_i(\mathbf{N}(\vec{X}, T)) = \sum_{s, s'} A(s \rightarrow s')(s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b \delta(N_j, s_j). \quad (3.2.4)$$

E, dessa forma, se obtém a equação de Boltzmann para gases em rede:

$$N_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i(\vec{X}, T) + \Omega_i(\mathbf{N}(\vec{X}, T)). \quad (3.2.5)$$

Sobre a hipótese das partículas serem não correlacionadas alguns comentários são necessários, pois mesmo que antes de uma colisão duas partículas sejam não correlacionadas, após a ocorrência de uma colisão, estas partículas devem apresentar uma correlação [Wolfram

1986], [Boghosian & Taylor 1995]. Deste modo a hipótese de não correlação entre as partículas seria formalmente inconsistente. Entretanto, as correlações produzidas pelas colisões somente são importantes se duas partículas que colidiram entre si, voltarem a colidir entre si, antes de perderem a correlação gerada pela primeira colisão. Em gases onde a densidade não é muito alta (hipótese que será utilizada) as partículas viajam um longo percurso, (comparado ao diâmetro da partícula), entre duas colisões, de modo que a grande maioria das colisões envolvem diferentes grupos de partículas e, portanto, duas partículas que colidiram entre si sofrerão diversas colisões antes de se encontrarem novamente perdendo assim qualquer correlação anteriormente existente.

A equação de Boltzmann para gases em rede (3.2.5) tem soluções estacionárias homogêneas que são de grande importância no estudo dos modelos de gás em rede, e que serão vistas em seguida.

3.3 - Distribuições de Equilíbrio

Da mesma forma como é usualmente feito em Teoria Cinética, dizemos que um gás está em um estado de equilíbrio quando este estado não é alterado por colisões. Tem-se então,

$$\Omega_i = 0 \quad (3.3.1)$$

e, portanto,

$$\sum_{s,s'} A(s \rightarrow s') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b (N_j)^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} = 0. \quad (3.3.2)$$

Considerando que a probabilidade de ocorrência de um estado s é dada por

$$P(s) = \prod_{j=1}^b (N_j)^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j}, \quad (3.3.3)$$

pode-se escrever a expressão (3.3.2) na forma:

$$\sum_{s,s'} A(s \rightarrow s') s'_i P(s) = \sum_s P(s) s_i \sum_{s'} A(s \rightarrow s'). \quad (3.3.4)$$

Lembrando que $\sum_{s'} A(s \rightarrow s') = 1$ e utilizando a condição de balanço semi-detalhado,

$\sum_{s'} A(s' \rightarrow s) = 1$, é possível escrever

$$\sum_{s,s'} A(s \rightarrow s') s'_i P(s) = \sum_s P(s) s_i \sum_{s'} A(s' \rightarrow s). \quad (3.3.5)$$

O lado direito da equação (3.3.5) pode ser reescrito trocando-se os índices s e s' , deste modo tem-se

$$\sum_{s,s'} A(s \rightarrow s') s'_i P(s) = \sum_{s,s'} A(s \rightarrow s') s'_i P(s'), \quad (3.3.6)$$

portanto,

$$P(s') = P(s). \quad (3.3.7)$$

Consequentemente, para um sistema em equilíbrio, todos os estados acessíveis por colisões são equiprováveis, ou ainda,

$$\prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} = \prod_{j=1}^b N_j^{s'_j} (1 - N_j)^{1-s'_j}. \quad (3.3.8)$$

Desenvolvendo a expressão acima pode-se escrever,

$$\sum_{j=1}^b s_j \ln \left(\frac{N_j}{1 - N_j} \right) = \sum_{j=1}^b s'_j \ln \left(\frac{N_j}{1 - N_j} \right). \quad (3.3.9)$$

Ou seja, a quantidade $\ln \left(\frac{N_j}{1 - N_j} \right)$ é uma grandeza conservada no processo de colisão, em

outras palavras, é um invariante colisional (observe a equação(2.2.5)). Como vimos, são invariantes colisionais o número de partículas e a quantidade de movimento.

Se ξ e ζ são invariantes colisionais, qualquer combinação linear entre ξ e ζ é, também, um invariante colisional. Assim, considerando-se um modelo de gás em rede onde os únicos invariantes colisionais são massa e quantidade de movimento, pode-se escrever

$$\ln \frac{N_i}{1 - N_i} = -h - q_x c_{ix} - q_y c_{iy} - q_z c_{iz} = -h - \vec{q} \cdot \vec{c}_i, \quad (3.3.10)$$

onde h e \vec{q} são constantes, e os sinais foram escolhidos de modo a obter uma forma final mais conveniente. Da equação acima, obtemos a distribuição de equilíbrio para gases em rede (*distribuição de Fermi-Dirac*):

$$N_i = \frac{1}{1 + e^{h + \vec{q} \cdot \vec{c}_i}}, \quad (3.3.11)$$

onde as constantes h e \vec{q} estão sujeitas à equações de vínculos associadas à conservação da massa e da quantidade de movimento:

$$\sum_i N_i = \rho, \quad (3.3.12)$$

$$\sum_i N_i c_i = \rho \bar{u}. \quad (3.3.13)$$

3.4 - Equilíbrio para baixas velocidades

As equações $\sum_i N_i = \rho$ e $\sum_i N_i \vec{c}_i = \rho \bar{u}$ definem implicitamente h e \vec{q} como funções de ρ e \bar{u} . Conhecendo-se $h(\rho, \bar{u})$ e $\vec{q}(\rho, \bar{u})$ é possível obter $N_i^{eq}(\rho, \bar{u})$. Entretanto, não é possível obter uma forma fechada para $N_i^{eq}(\rho, \bar{u})$. Contorna-se o problema representando $N_i^{eq}(\rho, \bar{u})$ como uma expansão em série. Para isso primeiramente faz-se a expansão de h e \vec{q} em potências de \bar{u} :

$$h(\rho, \bar{u}) = h_0 + h_2 u^2 + O(u^4) \quad (3.4.1)$$

$$\vec{q}(\rho, \bar{u}) = q_1 \bar{u} + O(u^3). \quad (3.4.2)$$

A forma das expansões acima, com $h(\rho, \bar{u})$ possuindo apenas potências pares de \bar{u} e $\bar{q}(\rho, \bar{u})$ possuindo apenas potências ímpares, é determinada pelo fato de que as populações devem ser invariantes a uma mudança de \bar{u} por $-\bar{u}$ e \bar{c}_i por $-\bar{c}_i$.

Definindo a função

$$F(x) = \frac{1}{1 + e^x}, \quad (3.4.3)$$

a distribuição de Fermi-Dirac pode ser escrita como $N_i^{eq} = F(h + \bar{q} \cdot \bar{c}_i)$. Faz-se uma expansão em série de Taylor de N_i^{eq} em torno de h_0 :

$$F(x) = F(x_0) + F'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}F''(x_0)(x - x_0)^2 + O((x - x_0)^3). \quad (3.4.4)$$

A partir da expressão acima, substituindo $x = h + \bar{q} \cdot \bar{u}$ e $x_0 = h_0$, e utilizando as expansões (3.4.1) e (3.4.2) tem-se

$$N_i^{eq} = F(h_0) + F'(h_0)(q_1 \bar{u} \cdot \bar{c}_i + h_2 u^2) + \frac{1}{2}F''(h_0)q_1^2 (\bar{u} \cdot \bar{c}_i)^2 + O(u^3) \quad (3.4.5)$$

Somando em i , fazendo $u = 0$, e lembrando que $\sum_i N_i = \rho$ obtém-se

$$F(h_0) = \frac{\rho}{b}. \quad (3.4.6)$$

Chamando $f = \frac{\rho}{b}$ e notando que $F' = -F(1 - F)$, a equação (3.4.5) pode ser escrita:

$$N_i^{eq} = f \left[1 - (1 - f)(q_1 \bar{u} \cdot \bar{c}_i + h_2 u^2) + \frac{1}{2}(1 - f)(1 - 2f)(q_1)^2 (\bar{u} \cdot \bar{c}_i)^2 \right], \quad (3.4.7)$$

onde os termos de ordem $O(u^3)$ foram desconsiderados.

Esta equação, substituída em $\sum_i N_i^{eq} = \rho$ resulta em

$$-f q_1 u_\alpha C_\alpha^{(1)} - b \bar{f} h_2 u^2 + \frac{1}{2} f (1 - 2f) (q_1)^2 u_\alpha u_\beta C_{\alpha\beta}^{(2)} = 0 \quad (3.4.8)$$

onde $C_{\alpha_1 \dots \alpha_r}^{(r)} = \sum_i c_{i\alpha_1} c_{i\alpha_2} \dots c_{i\alpha_r}$, e $\bar{f} = (1-f)$.

A substituição de (3.4.7) em $\sum_i N_i^{eq} c_{i\alpha} = \rho u_\alpha$, por sua vez resulta em

$$\rho u_\alpha = f C_\alpha^{(1)} - f \bar{f} q_1 u_\beta C_{\alpha\beta}^{(2)} + \left(\frac{1}{2} f \bar{f} (1-2f) (q_1)^2 C_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} - f \bar{f} h_2 C_\alpha^{(1)} \delta_{\beta\gamma} \right) u_\alpha u_\beta = 0 \quad (3.4.9)$$

As equações (3.4.8) e (3.4.9) permitem a determinação das duas incógnitas q_1 e h_2 . Para o modelo FHP é fácil ver que $C_{\alpha\beta}^{(2)} = 3\delta_{\alpha\beta}$, um resultado geral para D dimensões é apresentado na referência [Rothman & Zaleski1997], sendo

$$C_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{bc^2}{D} \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.4.10)$$

onde $c = |\bar{c}_i|$.

Utilizando, então, (3.4.8), (3.4.9) e (3.4.10), e o fato de que todos os tensores $C_{\alpha_1 \dots \alpha_r}^{(r)}$ de ordem ímpar se anulam [Rothman & Zaleski1997] encontra-se

$$q_1 = \frac{D}{(f-1)c^2}, \quad (3.4.11)$$

$$e \quad h_2 = \frac{1}{2} \frac{D}{c^2} \frac{1-2f}{(1-f)^2}. \quad (3.4.12)$$

Substituindo as expressões acima para h_2 e q_1 em (3.4.7) encontra-se

$$N_i^{eq} = f \left[1 + \frac{D}{c^2} u_\alpha c_{i\alpha} + \frac{D}{2} \frac{(1-2f)}{c^2(1-f)} u_\alpha u_\alpha + \frac{1}{2} \frac{(1-2f)}{(1-f)} \frac{D^2}{c^4} u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] \quad (3.4.13)$$

Definindo $G(f) = \frac{D^2}{2c^4} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right)$ e $Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}$ obtêm-se:

$$N_i^{eq} = f \left[1 + \frac{D}{c^2} u_\alpha c_{i\alpha} + G(f) Q_{i\alpha\beta} u_\alpha u_\beta \right] \quad (3.4.14)$$

A introdução de partículas em repouso nos sítios resulta em outras duas expressões para as distribuições de equilíbrio. Chamando de b_r o número máximo de partículas em repouso e b_m

o número de direções da rede, $b = b_r + b_m$. A densidade agora é escrita, considerando-se que as partículas em repouso são indistinguíveis, na forma,

$$\rho = \sum_i^{b_m} N_i + b_r N_o. \quad (3.4.15)$$

Fazendo um desenvolvimento análogo ao que foi feito para encontrar $N_i^{eq}(\rho, u)$ para um modelo sem partículas em repouso, obtêm-se

$$N_i^{eq} = f \left[1 + \frac{Db}{c^2 b_m} u_\alpha c_{i\alpha} + G(f) \frac{b^2}{b_m^2} \left(Q_{i\alpha\beta} + \frac{c^2 b_r}{Db} \delta_{\alpha\beta} \right) u_\alpha u_\beta \right], \quad (3.4.16)$$

e

$$N_o^{eq} = f \left[1 + G(f) \frac{bc^2}{b_m D} u^2 \right]. \quad (3.4.17)$$

As expressões (3.4.14), (3.4.16) e (3.4.17) para as distribuições de equilíbrio são necessárias para a determinação do comportamento macroscópico dos modelos. Isto ficará claro nas seções seguintes.

3.5 - Leis de Conservação

A função distribuição $N_i(\vec{X}, T)$ evolui de acordo com a equação de Boltzmann para gases em rede,

$$N_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T+1) - N_i(\vec{X}, T) = \Omega_i(\vec{X}, T) \quad (3.5.1)$$

Considerando uma rede de grandes dimensões e um grande intervalo de tempo pode-se aproximar espaço e tempo na rede por variáveis contínuas com as seguintes definições:

$$\vec{x} = \delta_x \vec{X}, \quad t = \delta T \quad \text{e} \quad \vec{c}_i = \frac{\delta_x}{\delta} \vec{c}_i, \quad (3.5.2)$$

onde $\delta_x, \delta \ll 1$. Estes *fatores de escala* são os responsáveis pela passagem de *variáveis de rede* (representadas em unidades de rede) para *variáveis físicas* (representadas em unidades como metro, segundo, etc). Como isso é feito será visto no capítulo 5.

Utilizando as definições acima rescrevemos a equação (3.5.1),

$$N_i(\bar{x} + \delta \bar{c}_i, t + \delta) - N_i(x, t) = \Omega_i(x, t) \quad (3.5.3)$$

Para que seja possível a obtenção de equações macroscópicas é necessário converter a equação acima em uma equação diferencial, o que é feito expandindo-se o primeiro termo da equação acima em série de Taylor; tem-se,

$$\begin{aligned} \delta \partial_t N_i + \delta c_{i\alpha} \partial_\alpha N_i + \frac{1}{2} \delta^2 \partial_t \partial_t N_i + \delta^2 c_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_t N_i \\ + \frac{1}{2} \delta^2 c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta N_i + O(\delta^3) = \Omega_i(\bar{x}, t). \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

Assumindo que as variações em N_i são pequenas, pode-se reter apenas os termos de primeira ordem em δ , obtendo desse modo uma equação que assume a forma da equação de Boltzmann:

$$\partial_t N_i + c_{i\alpha} \partial_\alpha N_i = \Omega_i. \quad (3.5.5)$$

A função de distribuição N_i será usada para a obtenção das grandezas macroscópicas médias. Em particular tem-se

$$\sum_i N_i = \rho, \quad (3.5.6)$$

$$\sum_i \bar{c}_i N_i = \rho \bar{v}, \quad (3.5.7)$$

onde ρ é o número médio de partículas num sítio e $\bar{v} = \frac{\delta_x}{\delta} \bar{u}$ a velocidade média dada em unidades físicas (a velocidade \bar{u} é dada em unidades de rede). Como as colisões devem conservar o número de partículas e a quantidade de movimento, impõe-se que

$$\sum_i \Omega_i = 0, \quad (3.5.8)$$

$$\sum_i \bar{c}_i \Omega_i = 0. \quad (3.5.9)$$

Partindo da equação de Boltzmann (3.5.5) e fazendo a soma sobre todas direções tem-se

$$\sum_i \partial_i N_i + \sum_i c_{i\alpha} \partial_\alpha N_i = \sum_i \Omega_i \quad (3.5.10)$$

ou,

$$\partial_i \sum_i N_i + \partial_\alpha \left(\sum_i c_{i\alpha} N_i \right) = 0 \quad (3.5.11)$$

reultando na equação

$$\partial_i \rho + \partial_\alpha (\rho v_\alpha) = 0, \quad (3.5.12)$$

que é a equação da continuidade para modelos de gás em rede.

É possível deduzir, da mesma forma, uma equação para a quantidade de movimento. Para isso multiplica-se a equação (3.5.5) por \bar{c}_i e faz-se a soma sobre as direções i , obtendo

$$\partial_i \sum_i c_{i\alpha} N_i + \sum_i c_{i\alpha} (c_{i\beta} \partial_\beta N_i) = 0. \quad (3.5.13)$$

Definindo o tensor densidade de fluxo de quantidade de movimento:

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i. \quad (3.5.14)$$

A equação (3.5.13), então, pode ser escrita

$$\partial_i (\rho v_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} = 0. \quad (3.5.15)$$

Não é possível, entretanto, obter nenhum resultado macroscópico para $\Pi_{\alpha\beta}$, aplicando diretamente as definições (3.5.6) e (3.5.7), como foi feito para a obtenção da equação da continuidade.

3.6 - Equação de Euler

A configuração macroscópica das partículas em um gás em rede torna-se rapidamente não-correlacionada devido as colisões de modo que um equilíbrio local é alcançado e pode ser descrito pelas quantidades médias [Wolfram 1986]. Assumindo esta hipótese e considerando $|\bar{u}| \ll 1$ pode-se utilizar a solução de equilíbrio $N_i^{eq}(\rho(\bar{x}, t), \rho\bar{u}(\bar{x}, t))$ para obter uma forma macroscópica para a equação da conservação da quantidade de movimento (válida até primeira ordem em δ). Pode-se escrever, portanto,

$$N_i(\bar{x}, t) = N_i^{(0)}(\bar{x}, t) = N_i^{eq}(\bar{x}, t), \quad (3.6.1)$$

onde $N_i^{(0)}(\bar{x}, t)$ indica primeira ordem em δ .

O tensor densidade de fluxo de quantidade de movimento nessa ordem é escrito:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i N_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta}, \quad (3.6.2)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = N^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} \left(\frac{\delta_x}{\delta} \right)^2. \quad (3.6.3)$$

Assim, a equação (3.5.15) pode ser escrita como:

$$\partial_i \rho v_\alpha + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0. \quad (3.6.4)$$

Substituindo $N_i^{(0)}$ pela aproximação dada pela equação (3.4.16) têm-se

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = f C_{\alpha\beta}^{(2)} \left(\frac{\delta_x}{\delta} \right)^2 + G(f) \frac{b^2}{b_m^2} \left(C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}^{(2)} + \frac{c^2 b_r}{Db} \right) u_\alpha u_\beta \left(\frac{\delta_x}{\delta} \right)^2. \quad (3.6.5)$$

Utilizando, então, a expressão dada para um tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$, que pode ser encontrada em [Rothman & Zaleski 1997],

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} \left[\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \right] \quad (3.6.6)$$

a equação (3.6.3) pode ser rescrita como:

$$\partial_t \rho v_\alpha + \partial_\beta [g(\rho) \rho v_\alpha v_\beta] = -\partial_\alpha (p(\rho, v^2)) \quad (3.6.7)$$

onde

$$g(\rho) = \frac{bD}{b_m(D+2)} \left(\frac{1 - \frac{2\rho}{b}}{1 - \frac{\rho}{b}} \right), \quad (3.6.8)$$

e

$$p(\rho, v^2) = c_s^2 \rho \left(\frac{\delta_x}{\delta} \right)^2 - \rho g(\rho) \frac{c_s^2}{c^2} \left(1 + \frac{D}{2} - \frac{c^2}{2c_s^2} \right) v^2. \quad (3.6.9)$$

A equação-de balanço de quantidade de movimento obtida para o gás em rede (3.6.7) difere da Equação de Euler devido ao coeficiente $g(\rho)$. Este coeficiente implica em ausência da *invariância de Galileu*, em outras palavras, a equação (3.6.7) não é invariante sob uma transformação $\vec{x} \rightarrow \vec{x} - \vec{w}t$, onde \vec{w} é uma velocidade constante [Frisch et al. 1987]. Outro problema é que a equação de estado obtida para pressão é dependente da velocidade. Estes problemas, contudo, não são importantes quando a velocidade é pequena, mais especificamente [Rothman & Zaleski 1997], [Santos et al. 2000] quanto $|\vec{u}| \ll c_s$, pois neste caso o fluxo pode ser considerado incompressível e com isso os efeitos de ordem $O(u^2)$ na pressão tornam-se irrelevantes. Além disso, com a densidade ρ considerada constante, é possível fazer a seguinte troca de variáveis

$$\vec{v} = g(\rho) \vec{v} \quad \text{e} \quad p' = g(\rho) p, \quad (3.6.10)$$

com isso a equação (3.6.7) pode ser rescrita

$$\partial_t \rho v_\alpha + \partial_\beta (\rho v_\alpha v_\beta) = -\partial_\alpha (p), \quad (3.6.11)$$

que é em tudo semelhante à equação de balanço de quantidade de movimento para um fluido invíscido (Equação de Euler).

3.7 - Método de Chapman-Enskog

Para a dedução do comportamento macroscópico do gás em rede utilizaremos o método de Chapman-Enskog. A referência mais importante no que se refere ao método é [Chapman & Coling 1952], outras referências utilizadas para esta seção foram [Cerciani 1990] e [Philippi 1998].

As colisões levam o gás em rede para uma configuração de equilíbrio que, como vimos, é descrita pelos invariantes colisionais ρ e $\rho\vec{v}$. Para a dedução do comportamento macroscópico do gás, este será considerado como estando localmente próximo do equilíbrio, ou seja, as correções em torno da distribuição de equilíbrio são pequenas.

Além disso, a densidade ρ e a quantidade de movimento $\rho\vec{v}$ variam em escala macroscópica, isto faz com que as derivadas espaciais e temporais de $N_i(\vec{x}, t)$ também sejam pequenas. Para melhor caracterizar esta idéia introduz-se um *tempo característico macroscópico* t_c e um *comprimento característico macroscópico* L , para os quais são válidas as relações:

$$t_c \gg \delta, \quad (3.7.1)$$

$$L \gg \delta_x. \quad (3.7.2)$$

Serão utilizadas variáveis adimensionais, t^* , \vec{x}^* e \vec{C}^* , e também o *número de Knudsen* (k_n) que são definidos:

$$t^* \equiv \frac{t}{t_c}, \quad \vec{x}^* \equiv \frac{\vec{x}}{L}, \quad \vec{C}^* \equiv \frac{\vec{C} t_c}{L}, \quad (3.7.3)$$

$$k_n \equiv \frac{\delta}{t_c}. \quad (3.7.4)$$

Considerando-se a distribuição N_i próxima da distribuição de equilíbrio N_i^{eq} , pode-se fazer a seguinte decomposição:

$$N_i = N_i^0 + k_n N_i^1 + (k_n)^2 N_i^2 + \dots, \quad (3.7.5)$$

onde $N_i^0 = N_i^{eq}$.

Utilizando, então, $\delta = k_n t_c$ na equação (3.5.4) pode-se escrever

$$k_n \left[\partial_i \cdot N_i + C_{i\alpha}^* \partial_\alpha \cdot N_i \right] + k_n^2 \left[\frac{1}{2} \partial_i \cdot \partial_i \cdot N_i + C_{i\alpha}^* \partial_\alpha \cdot \partial_i \cdot N_i + \frac{1}{2} C_{i\alpha}^* C_{i\beta}^* \partial_\alpha \cdot \partial_\beta \cdot N_i \right] = \Omega_i(x, t), \quad (3.7.6)$$

onde foram desprezados os termos de ordem k_n^3 e superior.

A derivada temporal também pode ser decomposta, para isso define-se

$$\partial_i \cdot \equiv \partial_0 \cdot + k_n \partial_1 \cdot + (k_n)^2 \partial_2 \cdot + \dots \quad (3.7.7)$$

O resultado da aplicação dos operadores $\partial_0 \cdot$, $\partial_1 \cdot$, etc., sobre a densidade ρ pode ser

obtido a partir das definições

$$\partial_0 \cdot (\rho) \equiv -\partial_\alpha \cdot (\rho v_\alpha^*), \quad (3.7.8)$$

$$\partial_r \cdot (\rho) \equiv 0, \quad \text{para } r \geq 1; \quad (3.7.9)$$

onde foi levado em consideração a equação da continuidade (3.5.12), e $v_\alpha^* = \sum_i N_i C_{i\alpha}^*$.

O resultado da aplicação dos operadores $\partial_0 \cdot$, $\partial_1 \cdot$, etc., sobre a quantidade de movimento

$\rho \vec{v}^*$ pode ser obtido a partir das definições

$$\partial_0 \cdot (\rho v_\alpha^*) \equiv -\partial_\alpha \cdot (\Pi_{\alpha\beta}^{*0}), \quad (3.7.10)$$

$$\partial_r \cdot (\rho v_\alpha^*) \equiv -\partial_\alpha \cdot (\Pi_{\alpha\beta}^{*r}), \quad \text{para } r \geq 1; \quad (3.7.11)$$

onde foi levada em consideração a equação da conservação da quantidade de movimento (3.5.15), e

$$\Pi_{\alpha\beta}^{*r} = \sum_i N_i^r C_{i\alpha}^* C_{i\beta}^*. \quad (3.7.12)$$

O operador de colisão também pode ser decomposto de forma análoga,

$$\Omega_i(N_1, \dots, N_b) = \Omega_i^0 + k_n \Omega_i^1 + (k_n)^2 \Omega_i^2 + \dots \quad (3.7.13)$$

É importante notar que $\Omega_i^0 = 0$ devido a própria definição de equilíbrio, pois

$$\Omega_i^0(N_1, \dots, N_b) = \Omega_i(N_1^{eq}, \dots, N_b^{eq}) = 0. \quad (3.7.14)$$

A substituição destas decomposições na equação (3.7.6), resulta em

$$k_n \left[\partial_0 N_i^0 + C_{i\alpha}^* \partial_\alpha N_i^0 \right] + k_n^2 \left[\frac{1}{2} \partial_0 \partial_0 N_i^0 + C_{i\alpha}^* \partial_\alpha \partial_0 N_i^0 + \frac{1}{2} C_{i\alpha}^* C_{i\beta}^* \partial_\alpha \partial_\beta N_i^0 + \right. \\ \left. \partial_0 N_i^1 + C_{i\beta}^* \partial_\beta N_i^1 + \partial_1 N_i^0 \right] + \dots = k_n \Omega_i^1 + (k_n)^2 \Omega_i^2 + \dots \quad (3.7.15)$$

Tem-se, portanto, um conjunto de b equações para cada ordem. Para primeira ordem as equações são escritas,

$$\partial_0 N_i^0 + C_{i\alpha}^* \partial_\alpha N_i^0 = \Omega_i^1. \quad (3.7.16)$$

A equação acima permite que se obtenha N_i^1 em função dos invariantes colisionais ρ e $\rho\vec{v}$. Para isso é necessário expressar o lado esquerdo da equação em termos destes invariantes e, além disso, linearizar o operador Ω_i para que se possa obter Ω_i^1 .

Para obter o lado esquerdo da equação (3.7.16) expresso em função de ρ e $\rho\vec{v}$, retorna-se a variáveis originais,

$$\partial_0 N_i^0 + C_{i\alpha} \partial_\alpha N_i^0 = \Omega_i^1, \quad (3.7.17)$$

e, em seguida, substituiu-se $N_i^0 = N_i^{eq}(\rho, \rho\vec{v})$; o resultado pode ser expresso:

$$\left[\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{b - b_m}{b b_m} \delta_{\alpha\beta} \right] \partial_\beta (\rho u_\alpha) = \frac{\Omega_i^1}{t_c}, \quad (3.7.18)$$

para as partículas em movimento e

$$-\frac{1}{b} \delta_{\alpha\beta} \partial_\beta (\rho v_\alpha) = \frac{\Omega_i^1}{t_c} \quad (3.7.19)$$

para i referindo-se às partículas em repouso.

O operador de colisão $\Omega_i(N_1, \dots, N_b) = \Omega_i(N_1^0 + k_n N_1^1 + \dots, \dots, N_b^0 + k_n N_b^1 + \dots)$ pode ser expresso como uma expansão em série de Taylor em torno de $N_i = N_i^0$. Portanto,

$$\Omega_i = \Omega_i(N_1^0, \dots, N_b^0) + \sum_{k=1}^b \frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_1^0, \dots, N_b^0} (k_n N_k^1) + \dots \quad (3.7.20)$$

E, assim tem-se

$$\Omega_i^1 = \sum_{k=1}^b \frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_1^0, \dots, N_b^0} N_k^1. \quad (3.7.21)$$

Pode-se considerar a distribuição de equilíbrio com $|\vec{v}| = 0$, ou seja, pode-se considerar

$N_i^0 = \frac{\rho}{b}$ na avaliação da expressão (3.7.21), pois a introdução de termos em $|\vec{v}|$ implicaria na

consideração de termos de ordem superior. Assim, considerando a expressão (3.1.7) tem-se

$$\frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_j^0=f} = \sum_{s,s'} A(s,s')(s'_i - s_i) f^{-1+\sum_j s_j} (1-f)^{-1+\sum_j (1-s_j)} (s_k - f) \quad (3.7.22)$$

Chamando $\frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_j^0=f} = \Lambda_{ik}$ é possível rescrever as equações (3.7.18) e (3.7.19):

$$\left[\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{b-b_m}{bb_m} \delta_{\alpha\beta} \right] \partial_\beta (\rho u_\alpha) = \frac{1}{t_c} \sum_k \Lambda_{ik} N_k^1, \quad (3.7.23)$$

$$-\frac{1}{b} \delta_{\alpha\beta} \partial_\beta (\rho v_\alpha) = \frac{1}{t_c} \sum_k \Lambda_{ik} N_k^1, \quad (3.7.24)$$

válidas para as partículas em movimento e para as partículas em repouso, respectivamente.

Estas equações permitem a obtenção de N_i^1 em função dos parâmetros macroscópicos, para tanto rescreve-se as equações na forma:

$$\sum_{\alpha\beta} \frac{D}{c^2 b_m} \partial_\beta (\rho v_\alpha) \begin{bmatrix} 0 \\ Q_{i\alpha\beta} \\ \vdots \\ \vdots \\ Q_{i\alpha\beta} \end{bmatrix} + \sum_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} \partial_\beta (\rho v_\alpha) \begin{bmatrix} -\frac{b_m}{b_r} \\ b_r \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{t_c} \Lambda \cdot \begin{bmatrix} N_0^1 \\ N_1^1 \\ \vdots \\ \vdots \\ N_{b_m}^1 \end{bmatrix} \quad (3.7.25)$$

onde b_r refere-se às partículas em repouso e Λ é uma matriz $b_m \times b_m$:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_{00} & \Lambda_{01} & \dots & \dots & \Lambda_{0b_m} \\ \Lambda_{10} & & & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ \Lambda_{b_m 0} & \dots & \dots & \dots & \Lambda_{b_m b_m} \end{bmatrix}. \quad (3.7.26)$$

Devido à conservação da massa e da quantidade de movimento a matriz Λ tem $(1, \dots, 1)$ e $(c_{1\alpha}, \dots, c_{b\alpha})$ como vetores característicos associados ao valor característico 0. Considerando apenas uma partícula em repouso, os outros vetores característicos são

$$\begin{bmatrix} 0 \\ \mathcal{Q}_{1xx} \\ \mathcal{Q}_{2xx} \\ \vdots \\ \mathcal{Q}_{b_m xx} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ \mathcal{Q}_{1xy} \\ \mathcal{Q}_{2xy} \\ \vdots \\ \mathcal{Q}_{b_m xy} \end{bmatrix}, \dots, \begin{bmatrix} 0 \\ \mathcal{Q}_{1zz} \\ \mathcal{Q}_{2zz} \\ \vdots \\ \mathcal{Q}_{b_m zz} \end{bmatrix}, \quad (3.7.27)$$

associados ao valor característico λ . E também

$$\begin{bmatrix} -b_m \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.7.28)$$

é um vetor característico, associado ao valor característico λ_0 . Os valores λ e λ_0 , obviamente, vão depender da forma do operador de colisão.

Os vetores característicos da matriz Λ formam uma base na qual é possível representar o vetor \mathbf{N}^1 . Chamando de $\Psi_k^{\alpha\beta}$ estes vetores característicos, escreve-se

$$\mathbf{N}^1 = \sum_k \sum_{\alpha\beta} a_k^{\alpha\beta} \Psi_k^{\alpha\beta}, \quad (3.7.29)$$

e portanto,

$$\Lambda \cdot \mathbf{N}^1 = \sum_k \sum_{\alpha\beta} a_k^{\alpha\beta} \lambda_k \Psi_k^{\alpha\beta}. \quad (3.7.30)$$

Substituindo $\Lambda \cdot \mathbf{N}^1$, dado acima, na expressão (3.7.25) determina-se os coeficientes

$a_k^{\alpha\beta}$:

$$a_Q^{\alpha\beta} = \frac{Dt_c}{\lambda c^2 b_m} \partial_\beta (\rho v_\alpha), \quad (3.7.31)$$

$$a_0 = \frac{t_c}{b^2} \partial_\beta (\rho v_\beta). \quad (3.7.32)$$

Retornando à expressão (3.7.29) temos então \mathbf{N}^1 como função dos parâmetros macroscópicos:

$$\mathbf{N}^1 = a_0 \begin{bmatrix} -b_m \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} + \sum_{\alpha\beta} a_Q^{\alpha\beta} \begin{bmatrix} 0 \\ Q_{1\alpha\beta} \\ Q_{2\alpha\beta} \\ \vdots \\ Q_{b_m\alpha\beta} \end{bmatrix}, \quad (3.7.33)$$

e, finalmente

$$N_0^1 = -\frac{t_c}{b\lambda_0} \partial_\beta (\rho v_\beta), \quad (3.7.34)$$

$$N_i^1 = \sum_{\alpha\beta} \frac{Dt_c}{\lambda_Q c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} \partial_\beta (\rho v_\alpha) + \frac{t_c}{b^2 \Lambda_{00}} \partial_\beta (\rho v_\beta). \quad (3.7.35)$$

A determinação de \mathbf{N}^1 como função dos parâmetros macroscópicos permite que se leve em consideração termos de segunda ordem na expressão (3.7.15) e assim torna-se possível a obtenção de uma equação de conservação da quantidade de movimento mais precisa do que a equação (3.7.7). Isto será feito na seção seguinte.

3.8 - Equação de Navier-Stokes

Partindo da equação (3.7.15), retornando às variáveis originais e considerando apenas os termos de segunda ordem tem-se:

$$\frac{1}{2}\partial_0\partial_0N_i^0 + \partial_0\partial_\alpha(N_i^0)c_{i\alpha} + \frac{1}{2}\partial_\alpha\partial_\beta(N_i^0)c_{i\alpha}c_{i\beta} + \partial_0\frac{N_i^1}{t_c} + c_{i\beta}\partial_\beta\frac{N_i^1}{t_c} + \frac{1}{t_c}\partial_1N_i^0 = \frac{\Omega_i^2}{t_c^2}. \quad (3.8.1)$$

Multiplicando por C_i , somando sobre i , e usando a equação da conservação da quantidade de movimento (3.5.12) é possível escrever,

$$\frac{1}{t_c}\partial_1\rho v_\beta + \frac{1}{t_c}\partial_\alpha\left(\sum_i N_i^1 c_{i\alpha} c_{i\beta}\right) + \frac{1}{2}\partial_\alpha\left(\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta}\left[\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\gamma\delta} + \frac{1}{bb_m}\delta_{\gamma\delta}\right]\partial_\gamma\rho v_\delta\right) = 0. \quad (3.8.2)$$

Substituindo, então, N_i^1 dado pelas expressões (3.7.34) e (3.7.35), utilizando (3.7.3) e (3.7.4), obtêm-se:

$$k_n\partial_1\rho v_\beta = \partial_\alpha\left(\frac{\delta_x^2}{\delta}v_2\partial_\gamma(\rho v_\gamma)\right) + \partial_\alpha\left(\frac{\delta_x^2}{\delta}v_1(\partial_\alpha\rho v_\beta + \partial_\beta\rho v_\alpha)\right), \quad (3.8.3)$$

onde

$$v_1 = -\frac{c^2}{D+2}\left(\frac{1}{\lambda_Q} + \frac{1}{2}\right), \quad (3.8.4)$$

$$v_2 = \frac{2c^2}{D(D+2)}\left(\frac{1}{\lambda_Q} + \frac{1}{2}\right) - \left(\frac{1}{b^2\Lambda_{00}} + \frac{1}{bb_m}\right)\frac{b_m c^2}{D(D+2)}. \quad (3.8.5)$$

Adicionando os termos de primeira ordem (Equação de Euler) e usando a definição (3.7.7) obtêm-se a equação

$$\partial_1\rho v_\beta + \partial_\alpha(g(\rho)v_\beta v_\alpha) = \partial_\alpha\left[\frac{\delta_x^2}{\delta}v_1(\partial_\alpha\rho v_\beta + \partial_\beta\rho v_\alpha)\right] + \partial_\beta\left[\frac{\delta_x^2}{\delta}v_2\partial_\alpha\rho v_\alpha\right] - \partial_\beta p. \quad (3.8.6)$$

onde p é a pressão, dada pela equação (3.5.9), $\frac{\delta_x^2}{\delta} \nu_1$ e $\frac{\delta_x^2}{\delta} \nu_2$ são os coeficientes de viscosidade em unidades físicas.

Quando o fluxo pode ser considerado incompressível tem-se a equação

$$\partial_i \rho v_\beta + \partial_\alpha (g(\rho) v_\beta v_\alpha) = \partial_\alpha \left[\frac{\delta_x^2}{\delta} \nu_1 (\partial_\alpha \rho v_\beta + \partial_\beta \rho v_\alpha) \right] + \partial_\beta p \quad (3.8.7)$$

que é análoga à equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis, diferindo desta apenas pela presença do fator $g(\rho)$ que, como foi visto na seção anterior, pode ser eliminado por uma mudança de variáveis.

CAPÍTULO 4 - MODELO DE REDE BGK

Neste capítulo é apresentado o modelo de rede BGK, um método de solução numérica das equações de Navier-Stokes baseado na equação de Boltzmann para gases em rede, vista no capítulo anterior. Dividiu-se o capítulo em três seções, nas duas primeiras o método é apresentado e, na seção 4.3 são apresentadas as equações que descrevem a dinâmica do modelo.

4.1 – Apresentação do método

O modelo de rede BGK [McNamara & Zanetti 1988], [Qian et al. 1992], desenvolvido a partir dos modelos de gás em rede booleanos, utiliza os mesmos tipos de rede (Rede regulares de Bravais) e possui a mesma dinâmica, cuja evolução pode ser dividida em *colisão* e *propagação*. Entretanto, ao invés de se utilizar variáveis booleanas, representando a presença ou ausência de partículas em um sítio, para depois tirar médias destas variáveis, utiliza-se uma variável real $N_i(\vec{X}, T)$ representando o valor médio do número de partículas com velocidade \vec{c}_i no ponto \vec{X} , no instante T . A equação de evolução do sistema é a equação de Boltzmann para gases em rede:

$$N_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i(\vec{X}, T) + \Omega_i(\vec{X}, T). \quad (4.1.1)$$

Utiliza-se um operador de colisão simplificado, que consiste na substituição do operador de colisão pela expressão [Qian et al. 1992]:

$$\Omega_i = \frac{N_i - N_i^{eq}}{\tau}, \quad (4.1.2)$$

onde τ é uma constante, denominada tempo de relaxação.

O efeito que o operador de colisão produz sobre o sistema é o de fazer com este se aproxime da distribuição N_i^{eq} . A rapidez com que isto ocorre vai depender do parâmetro τ .

Para o caso dos modelos de gás em rede o primeiro impulso é o de se utilizar como distribuição de equilíbrio a distribuição de Fermi-Dirac. Entretanto, como foi visto, a distribuição de Fermi-Dirac leva a equações macroscópicas nas quais a pressão é dependente da velocidade e que não são invariantes a uma transformação de Galileu. Se em vez de se utilizar a distribuição de Fermi-Dirac, se utilizar como ponto de partida uma distribuição com parâmetros indeterminados, impondo somente restrições de modo a garantir a conservação da massa e da quantidade de movimento, é possível ajustar os parâmetros indeterminados de modo a se obter as equações macroscópicas na forma desejada. Estas distribuições, comumente chamadas de *distribuição de pseudo-equilíbrio* são deduzidas na seção seguinte.

4.2 - Distribuições de *Pseudo-equilíbrio*

Nesta seção serão deduzidas as distribuições a serem utilizadas no modelo de rede BGK. Considerando que massa e quantidade de movimento são os únicos invariantes, as distribuições de equilíbrio devem ser especificadas por estas duas grandezas (veja seção 3.2). Escreve-se, então,

$$N_i^{eq} = A_i + B_{i\alpha}u_\alpha + D_{i\alpha\beta}u_\alpha u_\beta. \quad (4.2.1)$$

As configurações de equilíbrio devem permanecer inalteradas por quaisquer transformações que preservem a rede e a direção i , logo [Frisch et al. 1987]

$$A_i = A, \quad (4.2.2)$$

$$B_{i\alpha} = B c_{i\alpha}, \quad (4.2.3)$$

$$D_{i\alpha\beta} = D_1 c_{i\alpha} c_{i\beta} + D_2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.2.4)$$

E, considerando as partículas em repouso pode-se escrever,

$$N_0^{eq} = b_r A + D_3 \delta_{\alpha\beta} u_\alpha u_\beta, \quad (4.2.5)$$

onde b_r é um parâmetro livre e refere-se ao número de partículas em repouso.

Estas configurações, obviamente, devem obedecer às restrições com relação à conservação da massa e da quantidade de movimento:

$$\sum_{i=1}^{b_m} N_i^{eq} + N_0^{eq} = \rho, \quad (4.2.6)$$

$$\sum_{i=1}^{b_m} N_i^{eq} \vec{c}_i = \rho \vec{u}. \quad (4.2.7)$$

Utilizando a restrição (4.2.6) e fazendo $|\vec{u}| = 0$, tem-se

$$\sum_{i=1}^{b_m} A + b_r A = \rho, \quad (4.2.8)$$

e, chamando $b = b_r + b_m$ pode-se escrever

$$A = \frac{\rho}{b}. \quad (4.2.9)$$

A partir da restrição (4.2.7), escreve-se

$$\sum_{i=1}^{b_m} B u_\alpha c_{i\alpha} c_{i\beta} = \rho u_\beta, \quad (4.2.10)$$

e, lembrando que $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = \frac{b_m c^2}{D}$, encontra-se

$$B = \frac{\rho D}{b_m c^2}. \quad (4.2.11)$$

Utilizando novamente a expressão (4.2.6), agora com $|\vec{u}| \neq 0$ pode-se escrever,

$$D_1 u_\alpha u_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + D_2 u_\alpha u_\beta b_m + D_3 u_\alpha u_\beta = 0, \quad (4.2.12)$$

e, portanto,

$$D_3 = -b_m \left(\frac{D_1 c^2}{D} + D_2 \right). \quad (4.2.13)$$

As distribuições de equilíbrio, podem ser, então, escritas:

$$N_i^{eq} = \frac{\rho}{b} + \frac{\rho D}{b_m c^2} c_{i\alpha} u_\alpha + D_1 c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\alpha u_\beta + D_2 u_\alpha u_\alpha, \quad (4.2.13)$$

$$N_0^{eq} = b_r \frac{\rho}{b} - b_m \left(\frac{D_1 c^2}{D} + D_2 \right) u_\alpha u_\alpha. \quad (4.2.14)$$

Os parâmetros D_1 e D_2 devem ser ajustados de modo a fazer com que a pressão seja independente da velocidade e que as equações macroscópicas sejam invariantes sob uma transformação de Galileu (invariância Galileana). Tendo isso em vista, considere a equação da conservação da quantidade de movimento:

$$\partial_i (\rho \bar{u}) + \partial_\beta (\Pi_{\alpha\beta}) = 0, \quad (4.2.15)$$

onde $\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i N_i c_{i\alpha} c_{i\beta}$.

A expansão de N_i em torno do equilíbrio, considerando-se termos até primeira ordem, leva, como vimos, a equação de Euler. Substituindo, então, $N_i = N_i^{eq}$ na equação (4.2.15) tem-se,

$$\partial_i (\rho u_\alpha) + \partial_\beta \left[\frac{\rho}{b} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + D_1 u_\gamma u_\delta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} + D_2 u_\gamma u_\gamma \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] = 0. \quad (4.2.16)$$

Lembrando que $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} [\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}]$ rescreve-se a

equação acima:

$$\begin{aligned} \partial_i (\rho u_\alpha) + \partial_\alpha \left[\frac{\rho b_m c^2}{bD} + \left(D_2 \frac{b_m c^2}{D} + D_1 \frac{b_m c^4}{D(D+2)} \right) u_\beta u_\beta \right] \\ + \partial_\alpha \left[2D_1 \frac{b_m c^4}{D(D+2)} u_\beta u_\beta \right] = 0. \end{aligned} \quad (4.2.17)$$

Comparando a equação acima com a equação de Euler (3.5.11) nota-se que a invariância galileana pode ser obtida impondo-se que

$$2D_1 \left(\frac{b_m c^4}{D(D+2)} \right) = \rho, \quad (4.2.18)$$

e, como consequência, obtêm-se

$$D_1 = \frac{\rho D(D+2)}{2b_m c^4}. \quad (4.2.19)$$

Para que a pressão seja independente da velocidade é preciso que

$$D_2 \frac{b_m c^2}{D} + D_1 \frac{b_m c^4}{D(D+2)} = 0. \quad (4.2.20)$$

E, portanto,

$$D_2 = -\frac{\rho D}{2b_m c^2}. \quad (4.2.21)$$

Finalmente pode-se escrever as distribuições de equilíbrio utilizadas no modelo de rede

BGK:

$$N_i^{eq} = \frac{\rho}{b} + \frac{\rho D}{b_m c^2} c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{\rho D(D+2)}{2b_m c^4} c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\alpha u_\beta - \frac{\rho D}{2b_m c^2} u_\alpha u_\alpha, \quad (4.2.22)$$

$$N_0^{eq} = b_r \frac{\rho}{b} - \frac{\rho}{c^2} u_\alpha u_\alpha. \quad (4.2.23)$$

4.3 - Equações macroscópicas

Como foi visto na seção 3.4, partindo da equação de Boltzmann para gases em rede, é possível obter equações de contínuo para massa e quantidade de movimento:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho v_\alpha) = 0, \quad (4.3.1)$$

$$\partial_t (\rho v_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} = 0, \quad (4.3.2)$$

onde $\sum_i N_i = \rho$ é a densidade (número de partículas por sítio), $\sum_i \bar{C}_i N_i = \rho \bar{v}$ é quantidade de movimento, e $\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i C_{i\alpha} C_{i\beta} N_i$ é o tensor densidade de fluxo de quantidade de movimento.

Considerando $N_i \equiv N_i^0 = N_i^{eq}$, conforme o que foi realizado na seção 3.5, sendo N_i^{eq} dado pelas equações (4.2.22) e (4.2.23), tem-se

$$\partial_i \rho v_\alpha + \partial_\beta [\rho v_\alpha v_\beta] = -\partial_\alpha (p(\rho)), \quad (4.3.3)$$

com a pressão dada por

$$p = c_s^2 \rho. \quad (4.3.4)$$

Como era de se esperar a equação (4.3.3) é invariante sob uma transformação de Galileu e a pressão (4.3.4) é independente da velocidade.

Considerando a inclusão de correções na distribuição de equilíbrio (veja eq. (3.6.5)),

$$N_i = N_i^0 + k_n N_i^1, \quad (4.3.5)$$

é possível a obtenção de uma equação macroscópica para o balanço de quantidade de movimento. Para tanto é necessário um procedimento análogo ao que foi realizado nas seções 3.6 e 3.7, o resultado desse desenvolvimento é a seguinte equação

$$\begin{aligned} \partial_i \rho u_\alpha + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = \\ -\partial_\alpha [p(\rho)] + \partial_\beta \left\{ \frac{\delta_x^2}{\delta} v_1 [\partial_\beta (\rho u_\alpha) + \partial_\alpha (\rho u_\beta)] \right\} + \partial_\alpha \left[\frac{\delta_x^2}{\delta} v_2 \partial_\beta (\rho u_\beta) \right], \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

onde os coeficientes de viscosidade são dados por

$$v_1 = \frac{c^2}{(D+2)} \left(\tau - \frac{1}{2} \right), \quad (4.3.7)$$

$$v_2 = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{c^2 (D+2-2b)}{D(D+2)b}. \quad (4.3.8)$$

Quando o escoamento pode ser considerado incompressível, a equação (4.3.6) reduz-se a

$$\partial_\alpha u_\alpha + u_\beta \partial_\beta (u_\alpha) = -\frac{1}{\rho} \partial_\alpha [p(\rho)] + \left(\frac{\delta_x^2}{\delta} v_1 \right) \partial_\beta (u_\alpha), \quad (4.3.9)$$

que análoga à equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis.

O parâmetro τ possui o limite inferior $\tau=1/2$, abaixo do qual o método diverge, com valores negativos da distribuição N_i , caracterizando uma impossibilidade física. Esse limite inferior resulta, fundamentalmente, da natureza discreta do modelo (Rothman & Zaleski, 1997), crescendo em importância quando o número de direções da rede, b_m , decresce. Valores de τ , na faixa $1/2 < \tau < 1$, correspondem a esquemas de sobre-relaxação, adequados à solução de problemas envolvendo escoamentos a altos números de Reynolds, mas apresentando problemas de convergência e estabilidade numérica que se acentuam na vizinhança de $1/2$. Valores de $\tau > 1$ correspondem a esquemas numéricos de sub-relaxação, sem os problemas acima mencionados, mas mais exigentes do ponto de vista computacional, requerendo uma discretização mais fina do domínio espacial, com maior volume de memória residente e tempo de processamento, quando comparado com os esquemas de sobre-relaxação, para simulações de escoamentos com o mesmo Re^1 .

¹ De fato, observe-se que, em unidades de rede

$$Re = \frac{uL}{v_1}$$

onde L é o número de sítios dispostos sobre uma direção característica do domínio espacial. Como v_1 é função linear de τ , um aumento de τ , implica num aumento proporcional de L , para o mesmo Re .

CAPÍTULO 5 – IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS

São apresentadas neste capítulo considerações sobre como são feitas as simulações utilizando-se modelos de gás em rede e também resultados obtidos a partir de simulações. O capítulo é dividido em cinco seções, nas duas primeiras são discutidos aspectos computacionais relativos à implementação dos modelos de gás em rede booleanos e do modelo de rede BGK. Alguns aspectos da passagem de variáveis de rede para variáveis físicas são vistos na seção 5.3. Na seção 5.4 apresentamos resultados obtidos utilizando o modelo booleano, destacando-se nesta seção os resultados para a permeabilidade intrínseca de rochas. Por fim, na seção 5.5 são apresentados os resultados de simulações realizadas utilizando o modelo de rede BGK.

5.1 – Modelos booleanos

Na implementação computacional dos modelos de gás em rede booleanos utiliza-se uma variável tipo *char* (8 bits) para representação do estado de um sítio em duas dimensões, e, para para o caso 3D (modelo FCHC) é utilizada uma variável tipo *int* (32 bits) para a representação do estado de um sítio.

Uma vez inicializados os sítios com uma determinada densidade média seguem-se as etapas de colisão e propagação. A etapa de colisão pode ser realizada através de tabelas que indicam para cada estado pré-colisional, um ou mais estados pós-colisionais. Para modelos 3D, entretanto, a utilização de tabelas é bastante dificultada devido ao grande número de estados possíveis (acima de 16 milhões de estados). Tendo isso em vista optou-se pela utilização do que é normalmente chamado de esquema totalmente aleatório. Neste caso os estados possíveis são inicialmente separados em grupos de estados de mesmo número de partículas e igual quantidade

de movimento. Isto é feito durante a inicialização do programa, ficando os estados armazenados na memória. Durante a simulação tendo-se o número de partículas e a quantidade de movimento de um sítio da rede basta que se sorteie um estado qualquer do grupo de estados indicado por este número de partículas e esta quantidade de movimento para que se obtenha, assim, um estado pós-colisional.

É no processo de propagação que as informações são transmitidas através da rede, portanto é nesta etapa que as informações sobre a geometria e as condições de contorno são impostas. Se uma partícula durante a etapa de propagação encontra um obstáculo (um sítio pertencente a fase sólida) esta partícula não é propagada, permanece no mesmo sítio onde se encontrava, mas tem a sua velocidade alterada de \vec{c}_i para $-\vec{c}_i$ (condição *bounce back*), em outras palavras, a partícula é refletida num ângulo de 180 graus, conforme a figura 8.

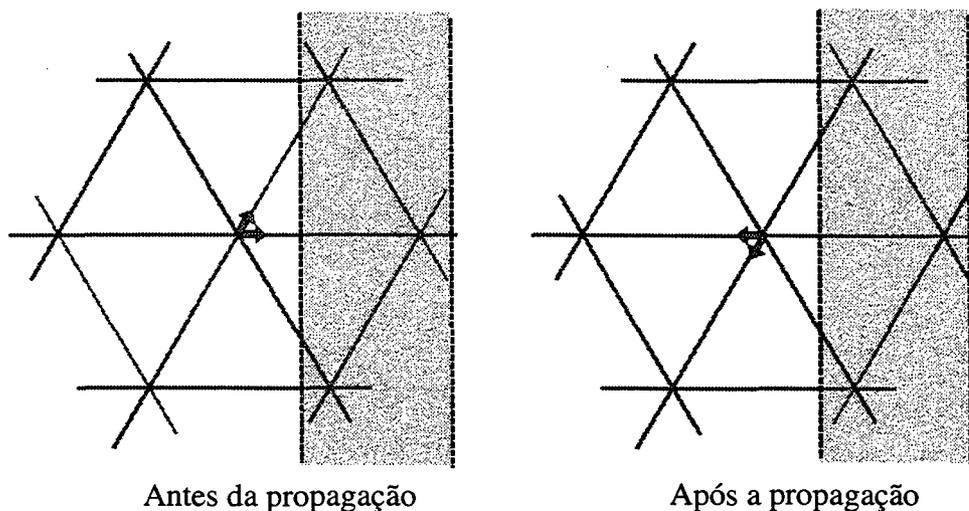


Figura 8 – Condição de contorno próxima a parede

A utilização deste tipo de condição de contorno resulta em uma condição de não escorregamento junto à parede, mais especificamente, tem-se uma velocidade nula, aproximadamente, no meio do caminho entre um sítio vizinho à parede e um sítio pertencente à parede.

Outro ponto importante é a condição que se deve impor nas fronteiras, na entrada e na saída. É possível a imposição valores aproximados de velocidade e pressão nos sítios de fronteira utilizando-se das direções que receberiam informações de fora do domínio onde se processa a simulação, veja a figura 9.

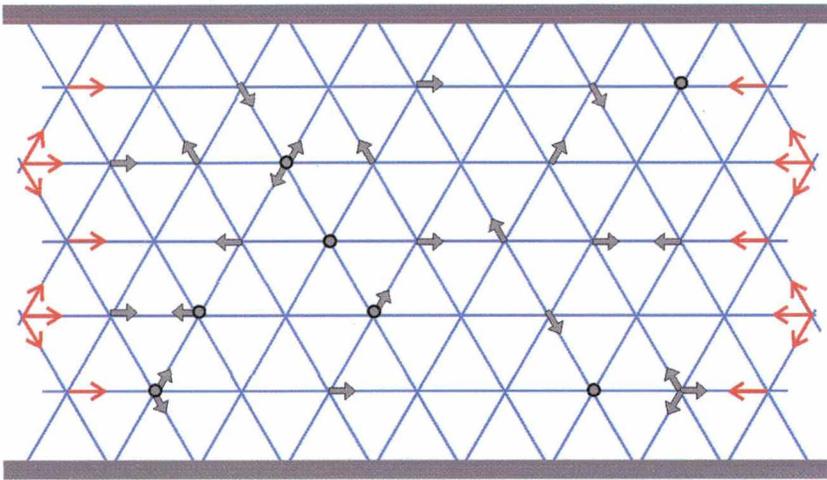


Figura 9 – Sítios onde são impostas as condições de contorno

Na figura 9 está representada uma região limitada por sólido nas fronteiras superior e inferior, e por regiões de entrada e saída nas fronteiras esquerda e direita. As direções marcadas em vermelho nos sítios de fronteira são as direções que devem receber informações de fora do domínio durante a etapa de propagação, ou seja, são as direções onde as condições de contorno são impostas. Para impor uma velocidade \vec{u} e uma densidade ρ substitui-se estes valores na distribuição de Fermi-Dirac N_i^{eq} (aproximada por (3.3.18)), obtendo assim a probabilidade de ocorrência uma partícula na direção i , a cada propagação as direções marcadas de vermelho nos sítios de fronteira são, então, atualizadas (coloca-se ou não partículas nesta direções) tendo em vista a distribuição de equilíbrio.

Uma outra possibilidade é a utilização de condições periódicas de contorno, neste caso considera-se que as regiões de entrada e saída estão ligadas, de modo que uma partícula saindo por uma fronteira retornará pelo lado oposto, conforme a figura 10.

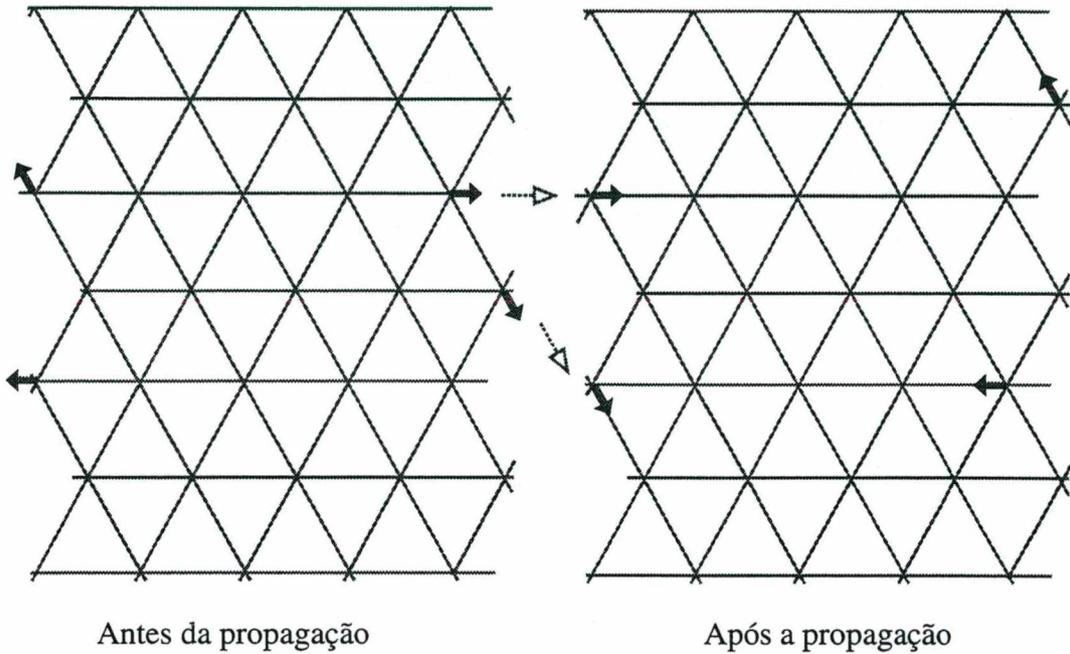


Figura 10 – Condições periódicas de contorno

Para que haja fluxo, neste caso, impõe-se uma força, isso pode ser feito alterando-se as configurações dos sítios com acréscimo de quantidade de movimento. É importante que esta alteração na configuração de um sítio seja realizada sem que altere o número de partículas e sem que haja violação do princípio da exclusão. Considere-se, e.g., a figura 11.

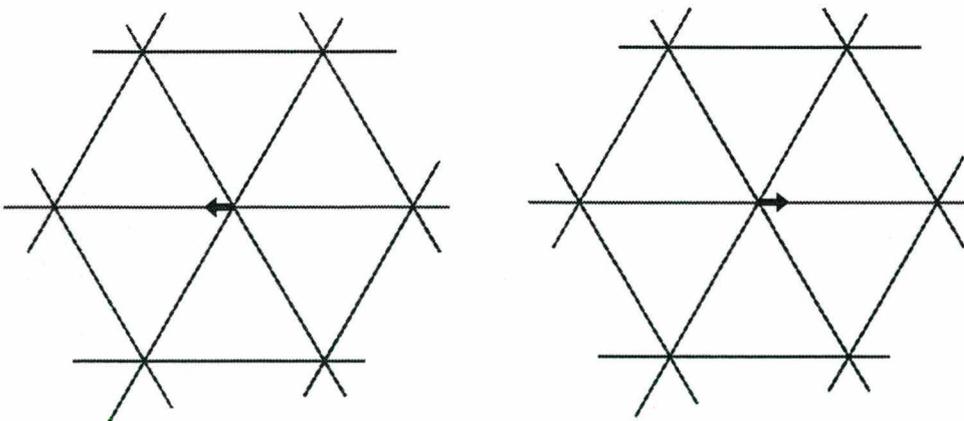


Figura 11 – Acréscimo de quantidade de movimento

Neste caso houve um acréscimo de duas unidades de quantidade de movimento. Para que não ocorram velocidades macroscópicas muito altas é necessário que as alterações de configuração dos sítios não ocorram sempre em todos os sítios, para tanto impõe-se uma

probabilidade para alteração de configuração, possível de ser, macroscopicamente, relacionada com a intensidade do campo externo agindo sobre o fluido.

Algumas palavras devem ser ditas sobre as médias temporais e espaciais utilizadas nas simulações apresentadas mais adiante neste capítulo e no capítulo 7. As médias temporais devem ser realizadas levando-se em consideração o tipo de processo que se pretende simular e o que se pretende obter a partir da simulação. Estas médias temporais são em tudo semelhantes às médias temporais presentes nos processos comuns de medição e podem, quando mal utilizadas, levar a resultados insatisfatórios, de maneira análoga ao caso de uma chapa fotográfica, que, quando exposta por um período longo comparado ao tempo em se processa o fenômeno que se deseja flagrar produz muitas vezes um simples borrão. Não existe regra que nos diga quantos passos são necessários para capturar os detalhes e ao mesmo tempo diminuir as flutuações inerentes aos modelos booleanos. Na maioria das vezes isto só é determinado a partir das próprias simulações.

Em relação às médias espaciais há uma peculiaridade: o tamanho das regiões utilizadas para o cálculo das médias está ligado ao tamanho da rede, ou seja, para se aumentar o número de elementos no cálculo da média deve se aumentar o tamanho da rede. Isto deve ser encarado sob dois aspectos: computacional e físico. Sob o aspecto computacional, obviamente, isto torna as simulações custosas e, especialmente em simulações 3D, a utilização destas médias pode ser inviável. Mas é o aspecto físico que é mais interessante, pois uma alteração do tamanho da rede pode alterar o problema que se deseja simular. Considere por exemplo um escoamento monofásico em que a dimensão característica consiste em d unidades de rede. Quando se altera o tamanho da rede, também se altera a dimensão característica em unidades de rede e, caso se queira manter o mesmo número de Reynolds, é necessário que se alterem as condições de contorno do problema (*em unidades de rede*). Isto é ainda mais evidente no caso de escoamentos bifásicos, onde, para se manter o problema que se deseja simular quando se alteram as dimensões

da rede devem ser alterados os valores de tensão interfacial e a distância de interação (o que nem sempre é possível, como será discutido mais adiante nos capítulos 6 e 7).

É possível ainda a realização de médias sobre todo o domínio quando se deseja uma propriedade global de um escoamento, por exemplo, como quando se deseja obter a vazão (nestes casos não há a necessidade de se alterar as dimensões da rede).

5.2 – Modelo de rede BGK

A implementação do modelo de rede BGK é mais que a simples que a implementação dos modelos booleanos, especialmente a etapa de colisão que é realizada simplesmente calculando-se o operador de colisão em cada sítio, e somando este operador à distribuição N_i do sítio. As condições de contorno, de um modo geral, também são mais facilmente impostas.

Condições periódicas de contorno, como apresentadas acima, são também utilizadas no modelo de rede BGK. Também é possível a imposição de uma velocidade \bar{u} e uma densidade ρ de maneira análoga ao que foi apresentado para o modelo booleano, utilizando as *distribuições de pseudo-equilíbrio* na atualização dos sítios de fronteira. Nas fronteiras com regiões de sólido, a condição de não escorregamento pode ser obtida utilizando o mesmo esquema apresentado para os modelos booleanos (*bounce back*). Outras formas de imposição de condições de contorno são apresentadas e discutidas na referência [Zou & He 1997].

5.3 – Fatores de escala e a passagem para variáveis físicas

As simulações com modelos de gás em rede booleanos e com o modelo de rede BGK são realizadas em um espaço discreto cuja distância de um ponto a outro é medida em *unidades de*

rede, sendo esta unidade igual a $|\bar{c}_i|$. Também o tempo é medido em unidades de rede, sendo um passo igual a uma atualização do sistema. Para fazer a passagem destas variáveis para as variáveis físicas (tais como metro ou segundo) é necessário a utilização de *fatores de escala*. No presente estudo serão utilizados somente fatores de escala para o espaço (δ_x) e para o tempo (δ), um fator de escala para massa é necessário quando se pretende simular escoamentos compressíveis[Rothman & Zaleski 1997]. Assim, \bar{x} e t em unidades físicas podem ser escritos:

$$\bar{x} = \delta_x \bar{X} , \quad (5.3.1)$$

$$t = \delta T . \quad (5.3.2)$$

5.4 – Resultados utilizando o modelo booleano

O escoamento bidimensional entre placas planas paralelas é bastante conhecido, e por isso foi escolhido para teste do modelo. Espera-se, neste caso, um perfil parabólico de velocidades. No resultado apresentado na figura 12 utilizou-se uma rede de 40 sítios na direção perpendicular ao fluxo e condições periódicas de contorno.

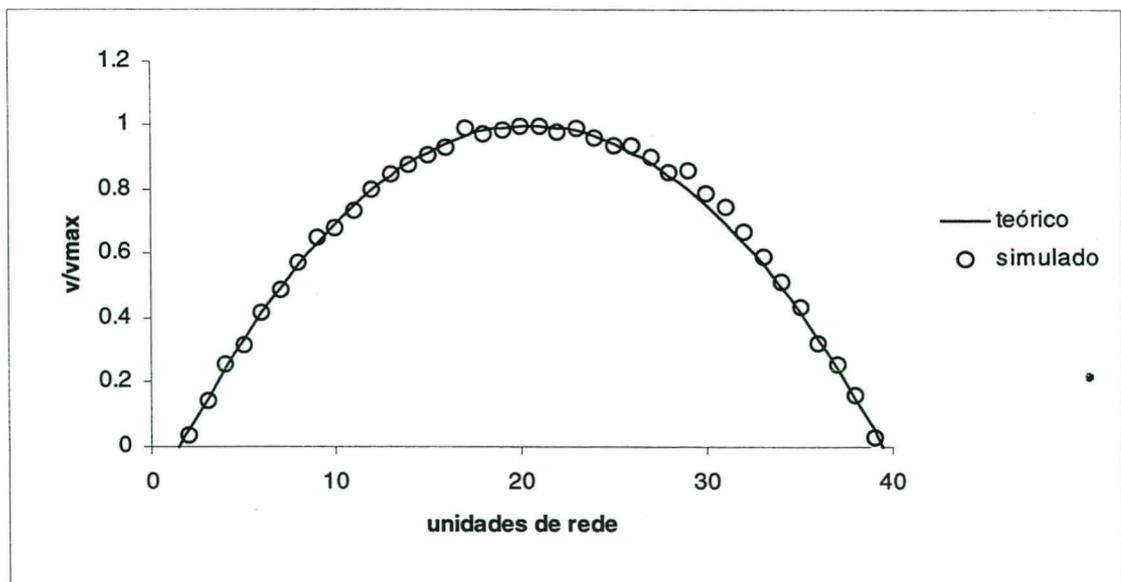


Figura 12 – Perfil parabólico de velocidades

O resultado acima foi obtido utilizando-se o modelo FHP com uma partícula em repouso e as mesmas regras de colisão do modelo 3D (totalmente aleatório). A densidade média utilizada foi de 3 partículas por sítio. Para estas regras de colisão, com esta densidade, a viscosidade cinemática é de aproximadamente 0,2 (em unidades de rede) de acordo com [Rothman & Zaleski 1997].

Para a obtenção do resultado acima foram realizadas médias temporais (foi calculada a média sobre 20 mil passos de tempo). Estas médias são necessárias sempre que se deseja o campo de velocidades ou o campo de pressão do escoamento. Quando se deseja uma propriedade global do escoamento, como a vazão, reduz-se o tempo de média temporal fazendo-se uma média espacial no domínio. Um caso em que é possível substituir médias temporais por médias espaciais é quando se deseja obter a permeabilidade intrínseca de um meio poroso [van Genabeek & Rothman 1996].

A permeabilidade intrínseca k é a constante que relaciona a vazão através de um meio poroso com a força aplicada para promover o fluxo através do meio, de acordo com a Lei de Darcy:

$$\bar{J} = -\frac{k}{\mu}(\bar{\nabla}p - \rho\bar{g}), \quad (5.4.1)$$

onde \bar{J} é a vazão, μ é a viscosidade do fluido, $\bar{\nabla}p$ é o gradiente de pressão, e $\rho\bar{g}$ uma força de campo.

Para a simulação de escoamentos através de meios porosos, utilizou-se condições periódicas de contorno; além disso, foi acrescentado ao meio uma região de escoamento livre para a uniformização do escoamento. Em parte desta região de uniformização insere-se uma zona de bombeamento onde o fluido é bombeado para o meio poroso, conforme a figura 13.

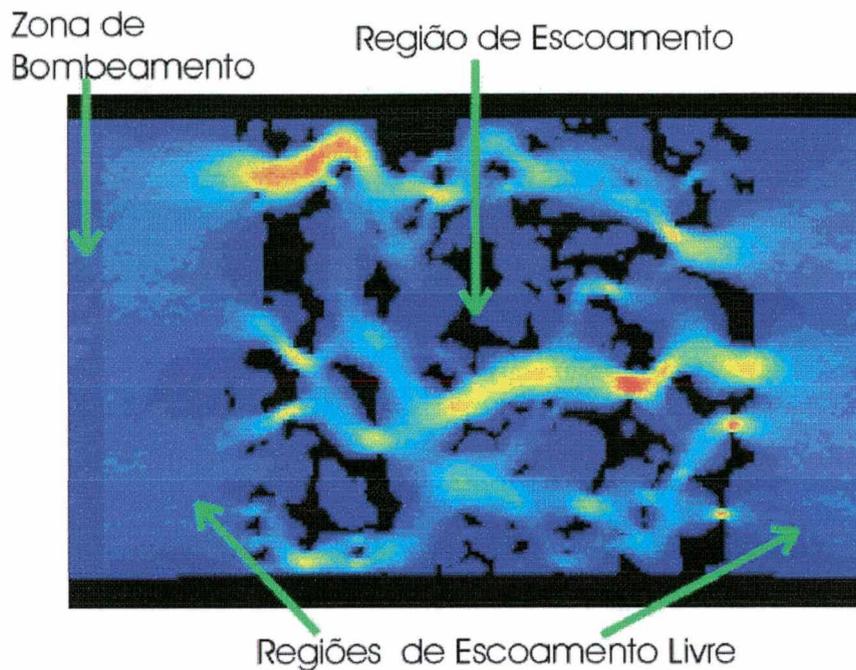


Figura 13 – Escoamento através de uma estrutura porosa com condições periódicas de contorno e zona de bombeamento.

Na figura 13 as cores indicam as diversas velocidades, indo do azul para velocidades mais baixas até o vermelho. Quando o equilíbrio é alcançado calcula-se a permeabilidade considerando a vazão e a quantidade de movimento que é acrescentada a cada passo.

O motivo de se utilizar uma região de bombeamento fora do meio poroso ao invés de utilizar uma força de campo agindo em todo o meio como sugerido em [Rothman & Zaleski 1997] fica claro quando se considera o que ocorre nas rugosidades presentes no meio poroso sob a ação de uma força de campo. Considere a situação representada na figura 14 para o modelo HPP (a utilização do modelo HPP como exemplo é uma questão de comodidade, as considerações apresentadas são válidas também para os outros modelos).

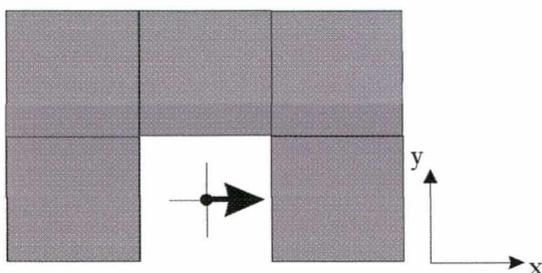


Figura 14 – Rugosidade representada por um único pixel (modelo HPP).

Em uma situação normal, a partícula cercada por sólido tem sua velocidade invertida a cada passo, a média da velocidade, como era de se esperar tende para zero. Suponha, entretanto, que uma força de campo esteja agindo sobre a região considerada na direção do eixo x . Esta força pode ser aplicada, através da adição de quantidade de movimento, somente quando houver uma partícula na direção negativa do eixo x e não houver uma partícula na direção positiva deste eixo. Suponha uma situação limite onde a adição de quantidade de movimento ocorra sempre que seja possível. Tem-se neste caso a situação apresentada na figura 15 (Não consideraremos as colisões na figura pois elas não alteram a quantidade de movimento e, no caso exemplificado, não alteram o estado do sítio).

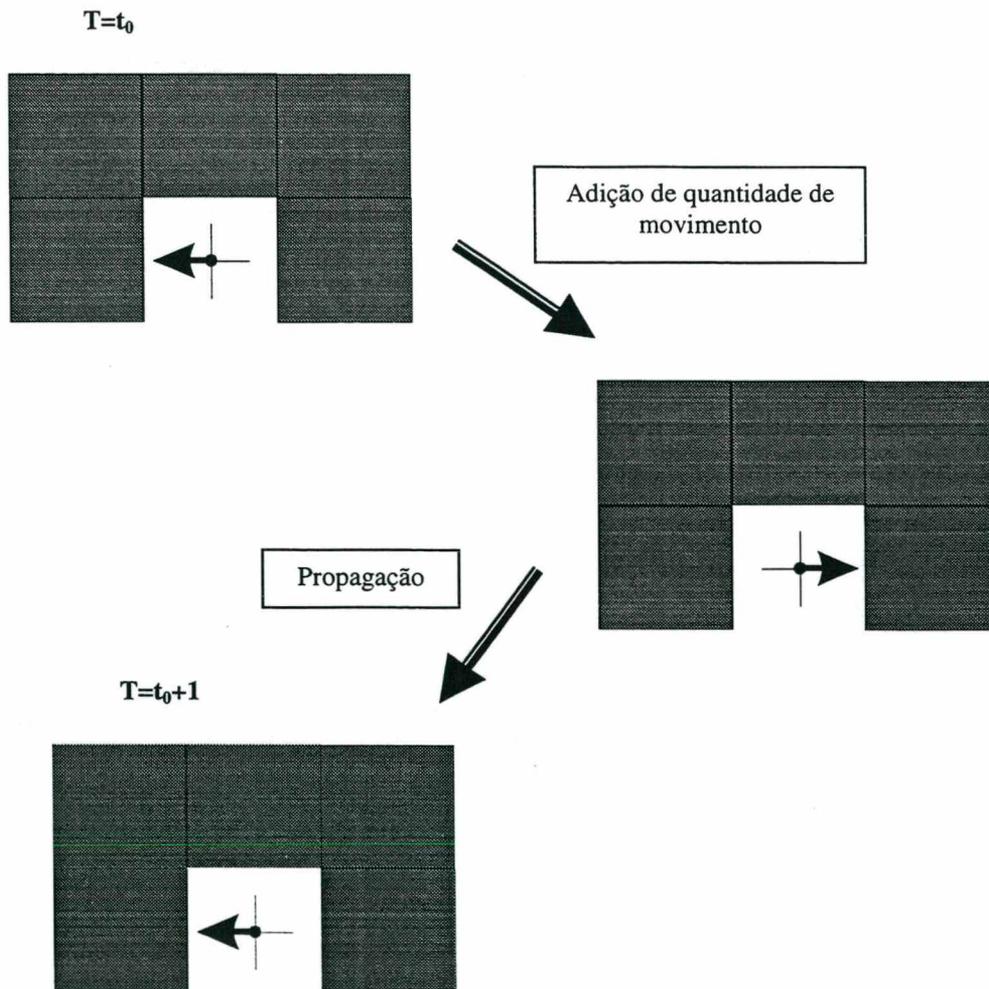


Figura 15 – Um passo na evolução de um sítio com adição de quantidade de movimento.

Nota-se que apesar da força aplicada, a velocidade no sítio em questão, é negativa. Isto pode ser, também, observado na figura 16, que apresenta o resultado de uma simulação de um escoamento através de um canal com rugosidades utilizando o modelo FHP, a intensidade do vetor velocidade é dada pela cor, indo do azul ao vermelho.

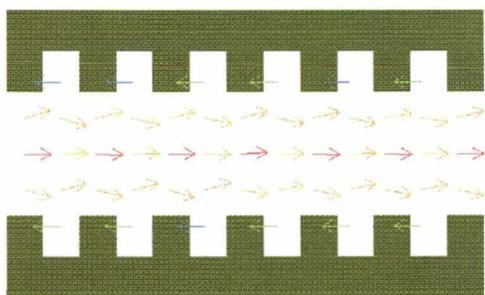


Figura 16 – Campo de velocidades em um canal com rugosidades.

Esta anomalia ocorre porque o comportamento do sítio não pode ser descrito pelas equações da hidrodinâmica, trata-se na realidade de um problema de Knudsen. Uma forma de resolução do problema seria uma alteração na escala do problema, a região analisada não seria então representada por um único sítio, mas por um conjunto de sítios cujo comportamento médio é descrito pelas equações da hidrodinâmica. Esta solução é a única possível quando se deseja o campo de velocidade em uma região como a descrita. Entretanto, quando se procura obter comportamento médio do escoamento, como no caso da determinação de permeabilidade intrínseca, é possível simplesmente eliminar o problema descrito deslocando-se a ação da força de campo para fora da região cujo escoamento se deseja obter. O resultado obtido para o caso em questão, adotando-se esta solução, seria a obtenção de velocidade média próxima de zero no sítio, como pode ser visto na figura 17 que apresenta uma simulação de um canal como da figura 16 com adição de quantidade de movimento fora da região de interesse.

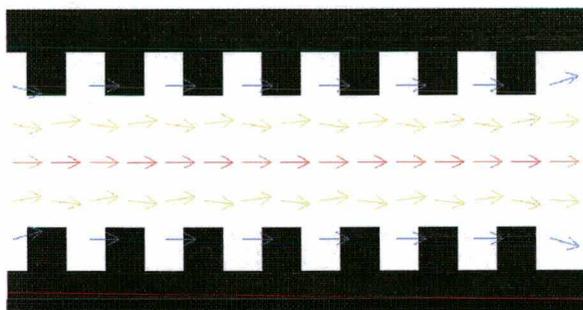


Figura 17 - Escoamento em um canal com rugosidades

Nas simulações realizadas para obtenção da permeabilidade intrínseca de rochas (arenitos), utilizou-se o modelo FCHC sem partículas em repouso, a viscosidade foi *medida* utilizando-se um escoamento tipo Poiseuille, de acordo com o pode ser encontrado na referência [Kadanoff et al. 1987], para este modelo $\nu = 0,3$ em unidades de rede. Foram utilizadas imagens 3D reconstruídas a partir de micrografias de lâminas de rocha. O método de reconstrução utilizado, apresentado em [Liang et al. 1998], conserva na imagem 3D características da imagem bidimensional binarizada, especificamente, a imagem 3D apresenta a mesma porosidade e a auto-correlação que são medidas na imagem bidimensional. As lâminas utilizadas e os resultados experimentais de permeabilidade foram fornecidos pelo CENPES/PETROBRAS.

| Amostra | Permeabilidade Experimental (mDa) | Dimensão linear da imagem(N) | Permeabilidade Simulada (mDa) |
|---------|-----------------------------------|------------------------------|-------------------------------|
| 67409 | 441 | 100 | 368 |
| 67409 | 441 | 200 | 462 |
| 59852 | 69.7 | 150 | 90 |
| 59853 | 145 | 100 | 238 |
| 59853 | 145 | 150 | 256 |
| 59852 | 69.7 | 200 | 77 |
| 51446 | 154 | 100 (200) | 81(128) |
| 51440 | 316 | 150 | 328 |
| 51440 | 316 | 100 | 316 |

O erro médio nas simulações em relação aos valores experimentais foi de 27%, ficando o erro máximo em torno de 76%, o que é um resultado bastante satisfatório, tendo em vista as dificuldades que envolvem a obtenção experimental da permeabilidade.

A grande variação nestes erros deve-se em parte à dimensão das imagens utilizadas nas simulações, mas este não é o único fator envolvido: o método de reconstrução também pode causar erros pois como conserva na imagem 3D apenas a porosidade e auto-correlação das imagens, não é adequado para reconstrução de imagens muito *ordenadas*, ou, em outras palavras imagens que não possam ser caracterizadas adequadamente sem a necessidade de outros momentos estatísticos além da porosidade e da auto-correlação. Assim, os erros encontrados são causados sobretudo pela dificuldade de se representar adequadamente um meio poroso tridimensional e não devido à utilização dos modelos de gás rede.

Outros comentários acerca da utilização dos modelos de rede booleanos para determinação de permeabilidade intrínseca são apresentados no apêndice B.

5.5 – Resultados utilizando o modelo de rede BGK

Com o modelo de rede BGK foram realizadas diversas simulações, considerando inclusive escoamentos em regime transiente. Tendo em vista o que foi apresentado para o modelo booleano, a primeira simulação a ser apresentada é uma comparação entre o perfil parabólico de velocidades, previsto para o escoamento entre placas paralelas e o resultado da simulação de um escoamento deste tipo usando o modelo de rede BGK (ver figura 18).

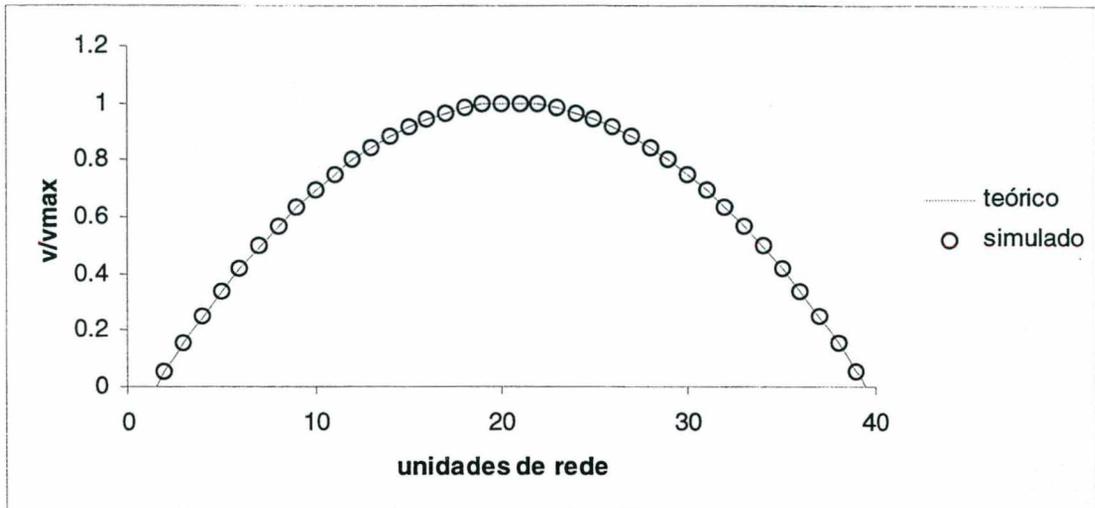


Figura 18 – Perfil parabólico de velocidades

Na seqüência são comparados os resultados obtidos com o modelo de rede BGK e resultados obtidos por volumes finitos para o problema de uma cavidade bidimensional quadrada cuja tampa na extremidade superior é movida com uma velocidade constante [Ghia et al. 1982]. Nas figura 19, 20 e 21 são apresentados os resultados da velocidade $v_x(y)$ em $x=L/2$, para valores de Reynolds 100, 400 e 1000.

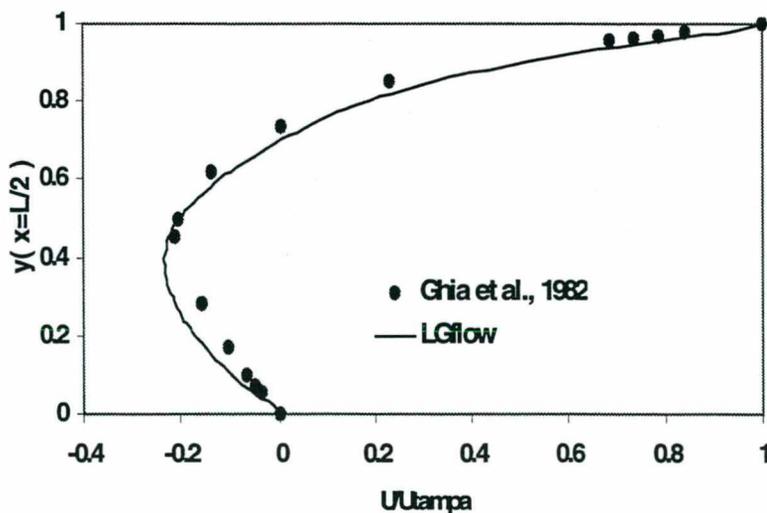


Figura 19 – Cavidade quadrada – Re=100

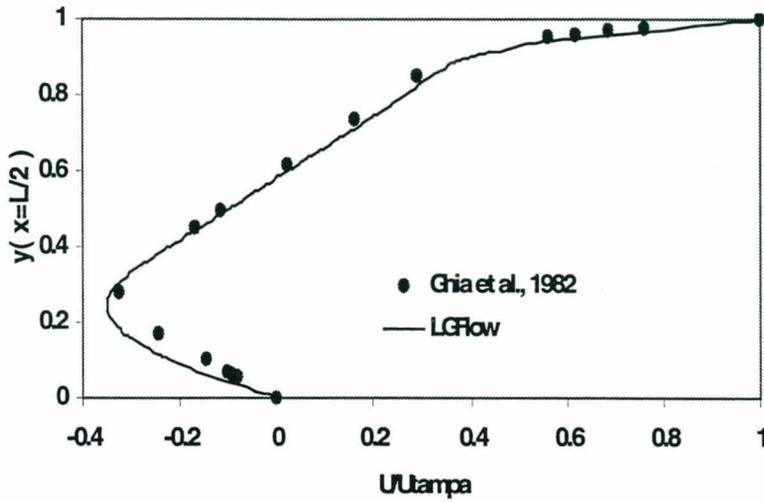


Figura 20 – Cavidade quadrada – $Re=400$

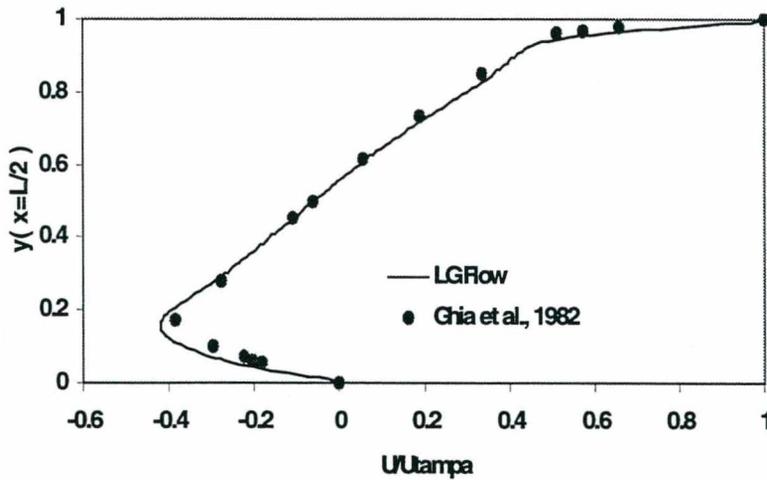


Figura 21 – Cavidade quadrada – $Re=1000$

Os resultados obtidos pelo método mostraram-se de acordo com os resultados obtidos por volumes finitos. Partiu-se, então para simulações de situações de regime transiente onde estão presentes efeitos inerciais, tais como esteiras de vórtices de von Karman. Uma simulação do surgimento dos vórtices é apresentada na seqüência (figuras 22, 23 24 e 25), neste caso temos o escoamento em torno de um cilindro (2D), cujo número de Reynolds é ~ 110 .

Utilizou-se o modelo FHP com uma partícula em repouso e uma rede de 360 por 440 unidades de rede.

Na figura 23 nota-se o surgimento da instabilidade cuja evolução é a formação de uma esteira de vórtices. Na seqüência são apresentadas imagens para dois outros instantes desta simulação.

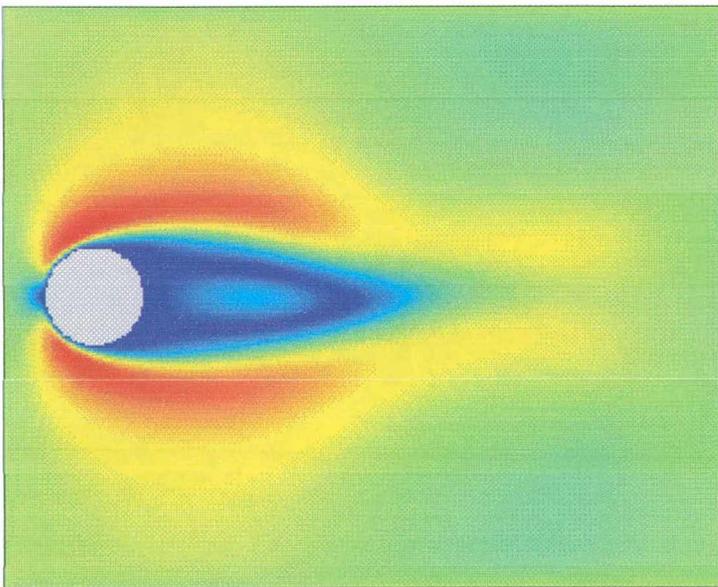


Figura 22 – Simulação do escoamento ao redor de um cilindro – 3400 passos

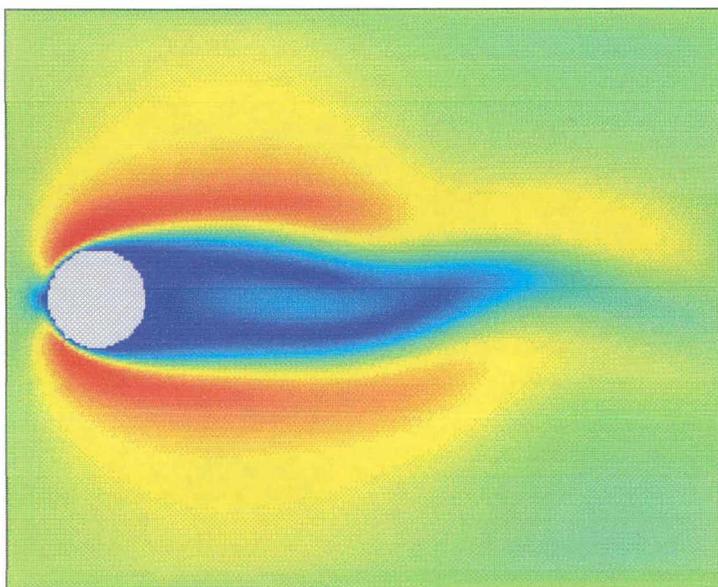


Figura 23 - Simulação do escoamento ao redor de um cilindro - 6000 passos

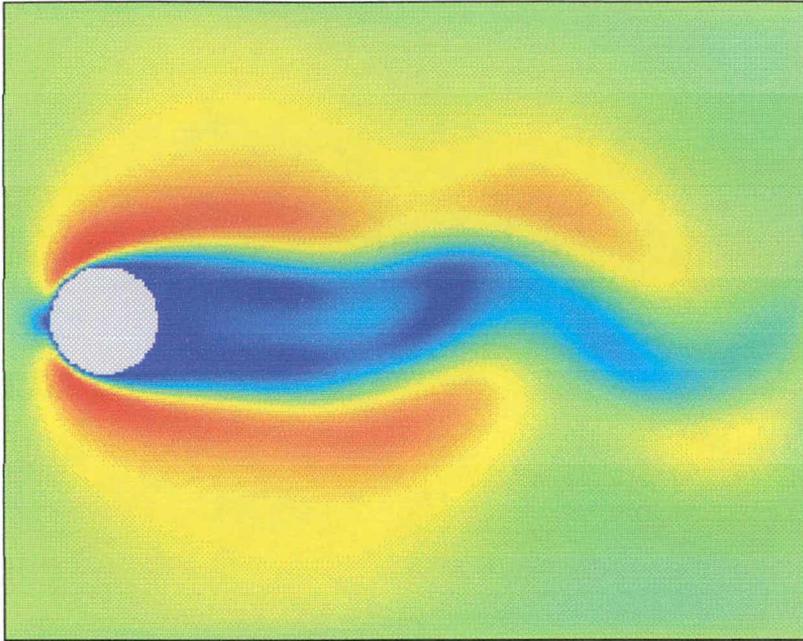


Figura 24 - Simulação do escoamento em torno de um cilindro - 7900 passos

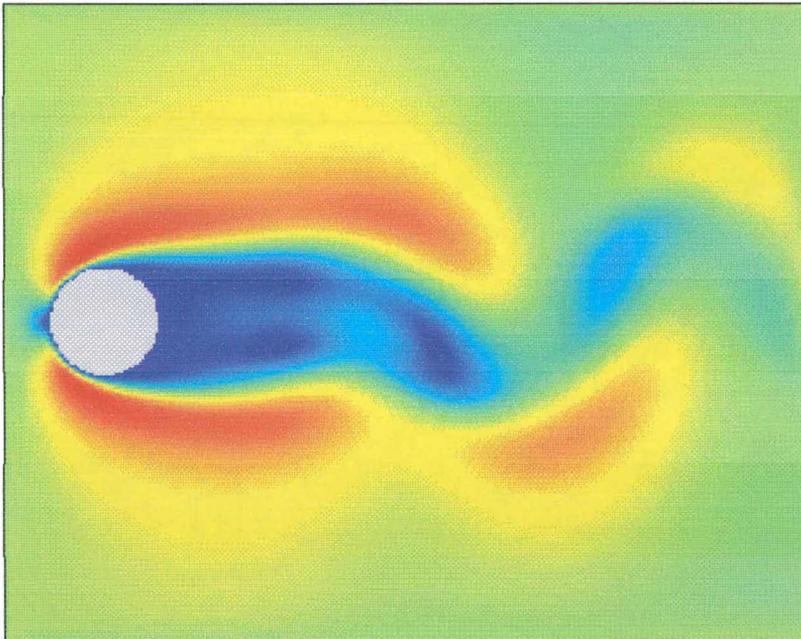


Figura 25 – Escoamento ao redor de um cilindro - 9100 passos

Na imagem da figura 25 os vórtices já estão bastante desenvolvidos, depois disso o escoamento simulado é periódico com os vórtices surgindo atrás do cilindro e se deslocando na direção do escoamento, alternadamente, na parte superior e inferior da imagem.

Na figura 26 é apresentada a fotografia de um escoamento [Batchelor 1967] e uma imagem obtida a partir da simulação de um escoamento semelhante. Note a semelhança entre a simulação e a fotografia, especialmente para os vórtices na parte posterior do cilindro .

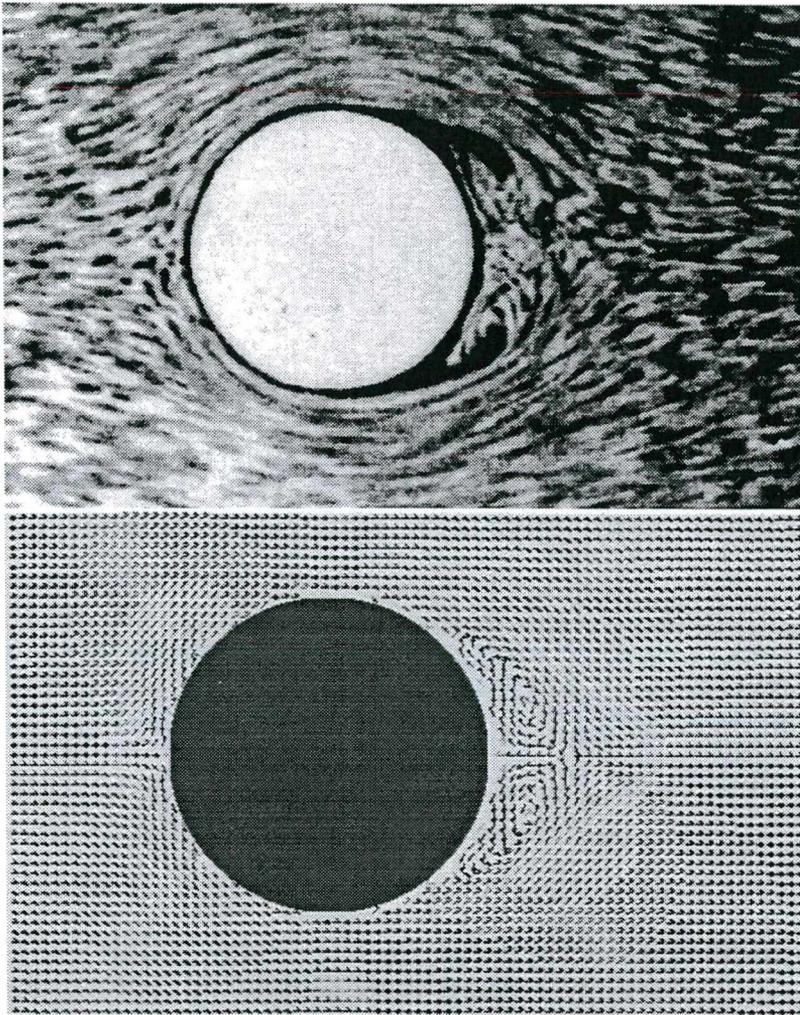


Figura 26 – Comparação entre uma fotografia e um escoamento simulado

Outros resultados e comentários sobre a utilização do modelo de rede BGK são apresentados nos apêndices C e D.

CAPÍTULO 6 - MODELOS DE GÁS EM REDE PARA FLUIDOS IMISCÍVEIS

Diversas modificações foram introduzidas nos primeiros modelos de gás em rede. Neste capítulo são apresentadas as modificações visando tornar possível a simulação de escoamentos de fluidos imiscíveis. O primeiro modelo desenvolvido com este objetivo foi proposto por D. H. Rothman e J. Keller em 1988 e caracteriza-se pela utilização, em cada sítio, da informação dos primeiros vizinhos para promover a separação entre os fluidos, ou seja trata-se de um modelo não-local. Modelos de gás em rede imiscíveis sem dependência explícita dos sítios vizinhos foram propostos por P. C. Rem e J. A. Somers (1989), e por S. Chen, G. Doolen, K. Eggert, D. Grunau e E. Loh (1991). O modelo de rede BGK também foi adaptado para simulação de escoamentos imiscíveis. O primeiro método proposto com este objetivo utiliza as mesmas idéias aplicadas no modelo booleano proposto por Rothman e Keller e foi apresentado em Gunstensen et al. 1991. Outros modelos foram propostos em [Grunau et al. 1993], [Shan et al. 1994] e [Orlandini et al. 1995].

Neste capítulo é apresentado o modelo proposto por Rothman e Keller, e também o modelo proposto por Chen et al.. Além disso é proposto e discutido um novo modelo para simulação de fluidos imiscíveis. Antes da apresentação dos modelos são discutidos os aspectos essenciais dos escoamentos de fluidos imiscíveis.

6.1 – Escoamentos de fluidos imiscíveis

Um escoamento bifásico é descrito pelas equações de Navier-Stokes e de conservação da massa para cada fase, mais as condições de contorno na interface entre as duas fases. Para um fluxo incompressível estas equações são escritas:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \quad (6.1.1)$$

$$\rho \partial_t \vec{u} + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} = -\vec{\nabla} p + \mu \nabla^2 \vec{u}, \quad (6.1.2)$$

onde ρ é a densidade, \vec{u} a velocidade, p a pressão e μ a viscosidade.

Duas condições governam o comportamento da interface, a primeira é a de que a velocidade normal à interface e junto desta, deve ser igual para as duas fases, e deve ser igual à componente normal da velocidade da interface, ou seja,

$$\vec{u}_1 \cdot \vec{n} = \vec{u}_2 \cdot \vec{n} = \vec{u}_s \cdot \vec{n} \quad (6.1.3)$$

onde \vec{n} é a normal na interface, \vec{u}_s é a velocidade da interface e os índices 1 e 2 indicam as duas fases.

A segunda condição é que diferença de tensão nas fases seja contrabalançada pela tensão superficial:

$$\overline{\overline{T}}_2 \cdot \vec{n} - \overline{\overline{T}}_1 \cdot \vec{n} = \left(\frac{\sigma}{R}\right) \vec{n} \quad (6.1.4)$$

onde σ é a tensão superficial, R é o raio de curvatura (considerado positivo quando o centro de curvatura está do lado da interface para o qual \vec{n} aponta), e $\overline{\overline{T}}$ é o tensor tensão,

$$\overline{\overline{T}} = -p\overline{\overline{I}} + \mu \left[\vec{\nabla} \vec{u} + (\vec{\nabla} \vec{u})^T \right]. \quad (6.1.5)$$

Quando se considera a interface como tendo espessura nula (o que não é o caso dos modelos de gás em rede) tem-se uma terceira condição: a velocidade tangencial à interface deve ser igual nos dois lados desta. Estas características, o comportamento das fases e da interface, é o que se espera obter com as modificações introduzidas nos modelos de gás em rede visando a simulação de fluidos imiscíveis. Entretanto a verificação destas condições, especialmente no que se refere ao comportamento da interface, não é tão óbvia quanto possa parecer a primeira vista. Uma discussão sobre isso é apresentada na seção 6.4.

6.2 – Modelo proposto por Rothman e Keller

O primeiro ponto a ser considerado quando se pretende que um modelo de gás em rede reproduza o escoamento de mais de um tipo de fluido é a necessidade de se utilizar variáveis que representem não só a presença ou ausência das partícula mas também o *tipo* de partícula, ou seja, a qual fluido pertence a partícula. É usual a atribuição de uma cor para fazer a distinção entre um fluido e outro, portanto na seqüência do capítulo será considerado que existem dois tipos de partículas: azuis e vermelhas.

No modelo proposto por Rothman e Keller o estado de um sítio é representado por dois conjuntos de variáveis booleanas: $r_i(\vec{X}, T)$, indicando a presença ou ausência de uma partícula vermelha; e $b_i(\vec{X}, T)$ indicando a presença ou ausência de uma partícula azul.

A dinâmica do modelo também pode ser dividida em etapas de colisão e propagação. Como será visto mais adiante, a propagação não é diferente dos modelos monofásicos. A colisão, entretanto, deixa de ser uma etapa local, utilizando as informações dos primeiros vizinhos para promover a separação entre as partículas azuis e vermelhas. Divide-se a etapa de colisão em três passos que serão detalhados a seguir: colisão monofásica, criação da tensão superficial e recoloração.

Colisão monofásica. A partir de r_i e b_i obtém-se $n_i = r_i + b_i$ e, sobre n_i é aplicado um processo de colisão idêntico ao dos modelos monofásicos, com conservação do número de partículas e da quantidade de movimento. Chamando de n'_i o resultado desta colisão monofásica escrevemos:

$$n'_i(\vec{X}, T) = n_i(\vec{X}, T) + \omega_i(\mathbf{n}(\vec{X}, T)). \quad (6.2.1)$$

Note que para que seja possível a realização deste processo de colisão idêntico ao processo de colisão dos modelos monofásicos é necessário que $n_i(\vec{X}, T) \in \{0, 1\}$, ou seja a

existência de uma partícula vermelha em uma direção i implica na ausência de uma partícula azul nesta direção e vice-versa.

Criação de tensão superficial. Para esta etapa será preciso a utilização de informações não-locais, para isso é definido um gradiente de cor \vec{g}_c :

$$\vec{g}_c = \sum_i \vec{c}_i \sum_j [r_j(\vec{X} + \vec{c}_i, T) - b_j(\vec{X} + \vec{c}_i, T)]. \quad (6.2.2)$$

No cálculo do gradiente de cor são verificados os primeiros vizinhos e, em cada sítio vizinho, é calculada a diferença entre o número de partículas vermelhas e azuis. O gradiente é um vetor apontando para a região de maior concentração de partículas vermelhas e menor concentração de partículas azuis. Somente a informação sobre a direção do vetor tem importância, pois é ela que é utilizada no processo de colisão.

Nesta etapa a distribuição $n'_i(\vec{X}, T)$ é alterada tendo como objetivo a obtenção de uma distribuição $n''_i(\vec{X}, T)$ que maximize a expressão

$$\sum_i n''_i |\vec{g}_c \cdot \vec{c}_i|, \quad (6.2.3)$$

restringindo-se as possíveis distribuições àquelas que conservem número de partículas e a quantidade de movimento. Nas regiões próximas a interface, esta maximização tem a função de diminuir as populações nas direções paralelas à interface aumentando as populações nas direções perpendiculares a esta, com isso criando a tensão interfacial.

Etapa de recoloração. O estado $n''_i(\vec{X}, T)$ é *recolocado*, ou seja, acrescenta-se informação de cor onde havia somente informação sobre presença ou ausência de partículas, obtendo-se, os estados $r'_i(\vec{X}, T)$ e $b'_i(\vec{X}, T)$. Nesta etapa deve-se manter o número total de partículas azuis e vermelhas que havia no sítio ao se iniciar o processo de colisão.

Para esta etapa é definido um *fluxo de cor* \vec{q} :

$$\bar{q}(\mathbf{r}, \mathbf{b}) = \sum_i \bar{c}_i (r_i - b_i). \quad (6.2.4)$$

Note que o fluxo de cor é a quantidade de movimento das partículas vermelhas menos a quantidade de movimento das partículas azuis em um sítio, este fluxo é máximo quando as partículas tendem a se separar (quando a quantidade de movimento das partículas vermelhas e azuis tem mesma direção e sentidos opostos). O fluxo de cor aponta para a direção para onde tendem ir as partículas vermelhas e para a direção de onde tendem a “fugir” as partículas azuis. Para evitar a difusão de uma cor em outra devem ser escolhidos os estados r_i'' e b_i'' que maximizem o fluxo de cor na direção do gradiente de cor, ou em outras palavras, que maximizem

$$\bar{q}(\mathbf{r}'', \mathbf{b}'') \cdot \bar{g}_c(\bar{X}, T). \quad (6.2.5)$$

É importante ressaltar que em regiões monofásicas a conservação da quantidade de movimento impede o processo de maximização acima, pois, neste caso, o fluxo \bar{q} , ou é igual a quantidade de movimento do sítio (regiões monofásicas vermelhas), ou é igual ao negativo da quantidade de movimento do sítio (regiões monofásicas azuis). Com isso a dinâmica nas regiões monofásicas tende a ser igual à descrita para os modelos monofásicos.

Tendo terminado a etapa de colisão processa-se a propagação que, como foi comentado, não difere da propagação realizada nos modelos monofásicos. Faz-se

$$r_i(\bar{X} + \bar{c}_i, T + 1) = r_i''(X, T) \quad (6.2.6)$$

$$b_i(\bar{X} + \bar{c}_i, T + 1) = b_i''(X, T). \quad (6.2.7)$$

Para demonstrar que o modelo proposto é capaz de simular o comportamento de fluidos imiscíveis, Rothman e Keller primeiramente simularam a separação entre dois fluidos imiscíveis que como condição inicial estão misturados com uma concentração de 50% de cada fluido. Os resultados apresentados na página seguinte (figura 27) foram obtidos na referência [Rothman & Zaleski 1997].

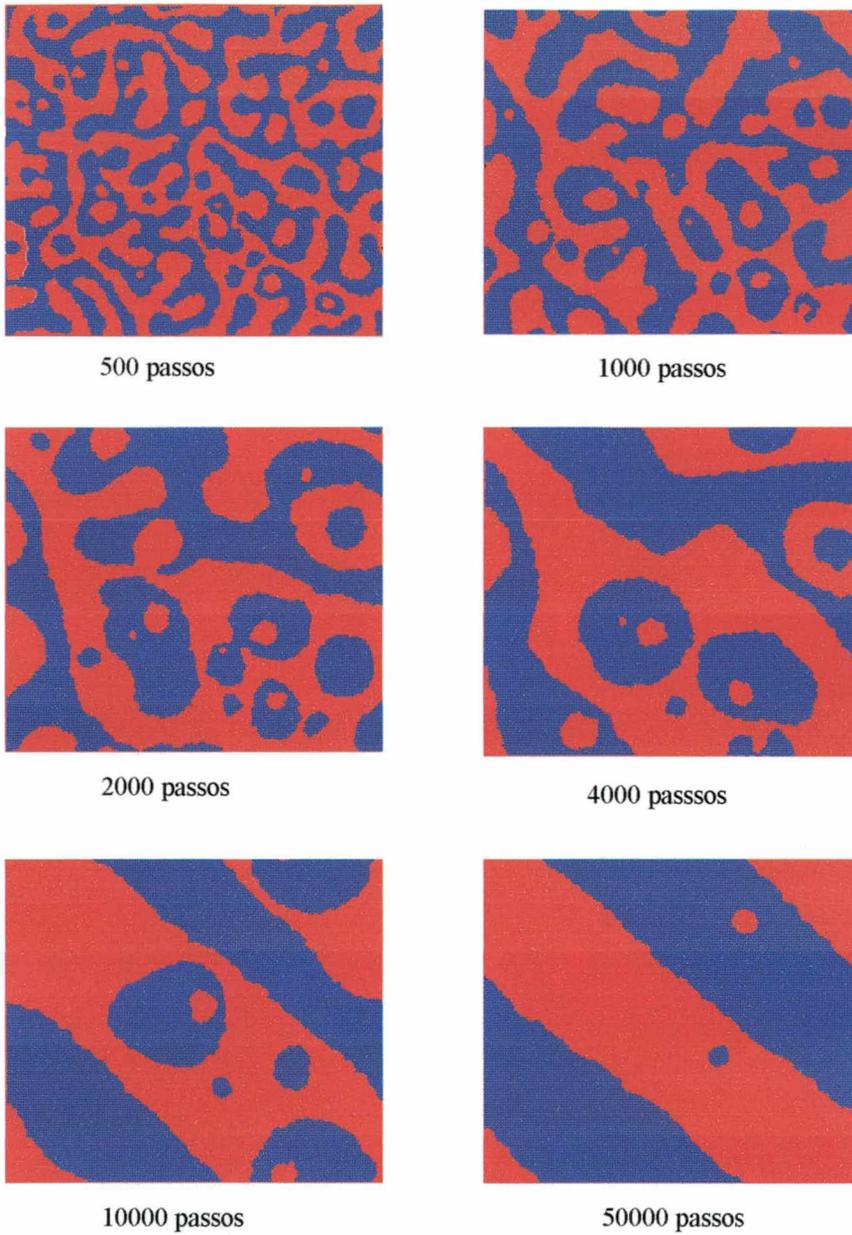


figura 27 – Separação de fases modelo proposto por Rothaman e Keller

Outro ponto que deve ser levado em consideração é que o modelo proposto deve obedecer à Lei de Laplace (6.1.4), que para o caso 2D pode ser escrita:

$$p_{in} - p_{out} = \frac{\sigma}{R}, \quad (6.2.8)$$

onde R refere-se ao raio de curvatura da interface, e p_{in} é a pressão na fase cuja interface é côncava, e p_{out} a pressão na fase cuja interface é convexa.

Rothman e Keller simularam bolhas de diversos diâmetros, a diferença de pressão dentro e fora da bolha deve ser proporcional ao inverso do raio da bolha: $\Delta p \propto 1/R$. Os resultados obtidos são apresentados figura 28.

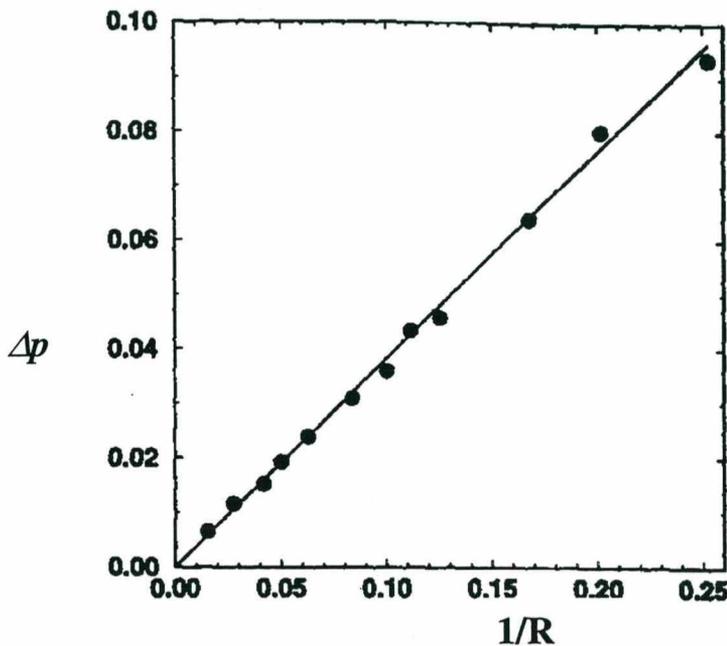


figura 28 – Verificação da Lei de Laplace

Pela figura 28 fica claro que o modelo obedece à Lei de Laplace, uma discussão sobre como e porque isso ocorre é apresentada em [Adler et al. 1994].

6.3 – Modelo proposto por Chen, Doolen, Eggert, Grunau e Loh

Em 1991 foi proposto o modelo que será apresentado nesta seção, cuja principal característica é utilização somente de informações locais para a simulação de fluidos imiscíveis. Neste modelo o estado de um sítio é, também, caracterizado por dois conjuntos de variáveis booleanas \mathbf{n} e \mathbf{f} . A variável $n_i(\vec{X}, T)$, como nos modelos monofásicos, indica a presença ou ausência de uma partícula, e a variável $f_i(\vec{X}, T)$ atribui uma cor para a direção i do sítio na posição \vec{X} . A atribuição de cor independe da presença de partícula, assim, quando não há

partícula em uma direção, tem-se o que foi chamado pelos criadores do modelo de *buracos coloridos*. A propagação das informações de cores através destes buracos coloridos elimina a necessidade de consulta aos vizinhos para promover a separação de cores, como é realizado no modelo proposto por Rothman e Keller.

A dinâmica, como nos outros modelos, pode ser dividida em propagação e colisão. Quando uma partícula muda sua direção durante a colisão a informação de cor é mantida na direção, criando-se assim um buraco da mesma cor da partícula; da mesma forma, quando uma partícula passa a ocupar uma direção onde não havia partícula, ela aniquila o buraco que existia naquela direção. Durante a etapa de colisão são utilizadas as informações propagadas pelos buracos coloridos para processar a separação de fases. Chamando os estados pós-colisionais de \mathbf{n}' e \mathbf{f}' , as restrições com relação à conservação do número de partículas azuis e vermelhas, e conservação de quantidade de movimento total podem ser escritas:

$$\sum_i n_i f_i = \sum_i n'_i f'_i, \quad (6.3.1)$$

$$\sum_i n_i (1 - f_i) = \sum_i n'_i (1 - f'_i), \quad (6.3.2)$$

$$\sum_i n_i \bar{c}_i = \sum_i n'_i \bar{c}_i. \quad (6.3.3)$$

Mantendo-se as restrições acima, são alteradas as regras de colisão para promover a separação entre as cores. É definido o *fluxo de partículas coloridas* \bar{q} e o *fluxo de buracos coloridos* \bar{q}_H :

$$\bar{q}(\mathbf{n}, \mathbf{f}) = \sum_i (2f_i - 1) n_i \bar{c}_i, \quad (6.3.4)$$

$$\bar{q}_H(\mathbf{n}, \mathbf{f}) = \sum_i (2f_i - 1) (1 - n_i) \bar{c}_i. \quad (6.3.5)$$

Chamando de azul a cor indicada por $f_i = 0$, e vermelho a cor indicada $f_i = 1$, têm-se o fluxo de partículas \bar{q} igual ao fluxo de cor definido na seção anterior. Este, como vimos, é a

quantidade de movimento das partículas vermelhas menos a quantidade de movimento das partículas azuis no sítio.

As novas regras de colisão são as seguintes:

i – O estado de saída deve ser escolhido de modo que $Q = -\vec{q}(\mathbf{n}, \mathbf{f}) \cdot \vec{q}_H(\mathbf{n}', \mathbf{f}')$ seja máximo. Com isso procura-se fazer com que o fluxo de partículas de uma cor, digamos vermelha, seja contrário ao fluxo de buracos da mesma cor. Da mesma forma como a presença de um buraco vermelho na direção i indica a presença de uma partícula vermelha na região apontada por $-i$, o fluxo $-\vec{q}_H(\mathbf{n}', \mathbf{f}')$ aponta para uma região onde deve existir partículas vermelhas, por isso procura-se fazer com que o fluxo de partículas seja máximo nesta direção.

Esta regra é a principal para a separação de fases, as regras abaixo são utilizadas quando várias configurações para \mathbf{n}' e \mathbf{f}' resultam no mesmo valor máximo para Q .

ii – Se diversas configurações para \mathbf{n}' e \mathbf{f}' implicam no mesmo valor máximo para Q , então deve-se escolher a configuração que minimize o fluxo de partículas, ou seja procura-se minimizar $|\vec{q}|$. Esta escolha, segundo os autores do modelo, tende a estabilizar a interface.

iii – Se ainda há mais de uma escolha possível, deve ser escolhido o estado de saída que possua partícula em repouso. Com isso diminuiu-se a velocidade do fluxo e aumenta-se a separação de fases.

iv – Se, ainda assim, mais de um estado é possível, escolhe-se um estado de saída que seja diferente do estado pré-colisional. Isso tende a diminuir a viscosidade através do aumento das colisões.

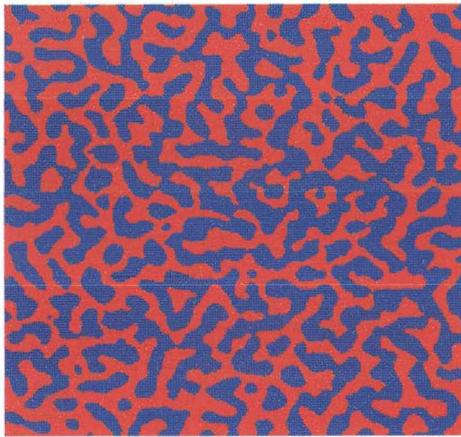
Se após as etapas acima ainda resta mais de uma saída possível escolhe-se aleatoriamente entre as escolhas possíveis.

Terminado o processo de colisão partículas e buracos são propagados de maneira análoga aos modelos anteriormente vistos:

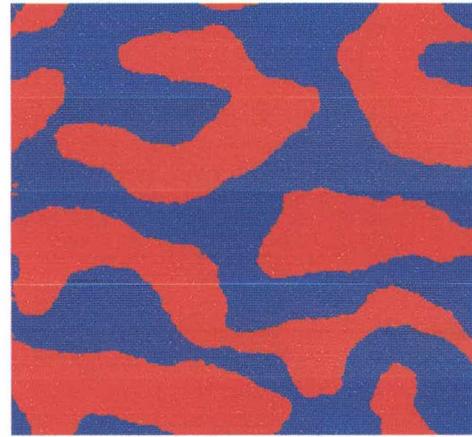
$$n_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = n'_i(\vec{X}, T), \quad (6.3.6)$$

$$f_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = f'_i(\vec{X}, T). \quad (6.3.7)$$

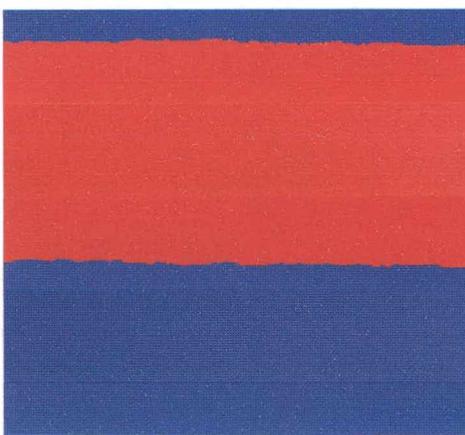
Como realizado por Rothman e Keller, Chen et al. realizaram simulações na qual os fluidos são misturados e cuja evolução leva à separação entre os dois fluidos. Os resultados que apresentamos na figura 29 foram retirados da referência [Chen et al. 1991], a concentração da mistura é de 50% de cada fluido.



200 passos



3300 passos



45000 passos

Figura 29 – Separação de fases no modelo proposto por Chen et al.

O modelo proposto por Chen et al. também se comporta de acordo com a Lei de Laplace, conforme pode ser verificado a partir da figura 30 [Chen et al. 1994].

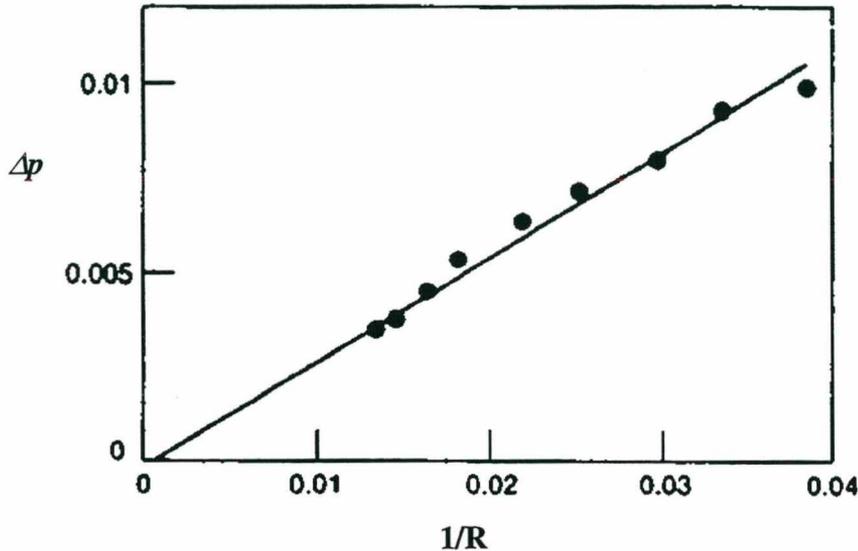


Figura 30 – Verificação da Lei de Laplace

O salto de pressão que ocorre na interface pode ser visto com clareza na figura 31, onde é apresentado o perfil de pressão de uma bolha.

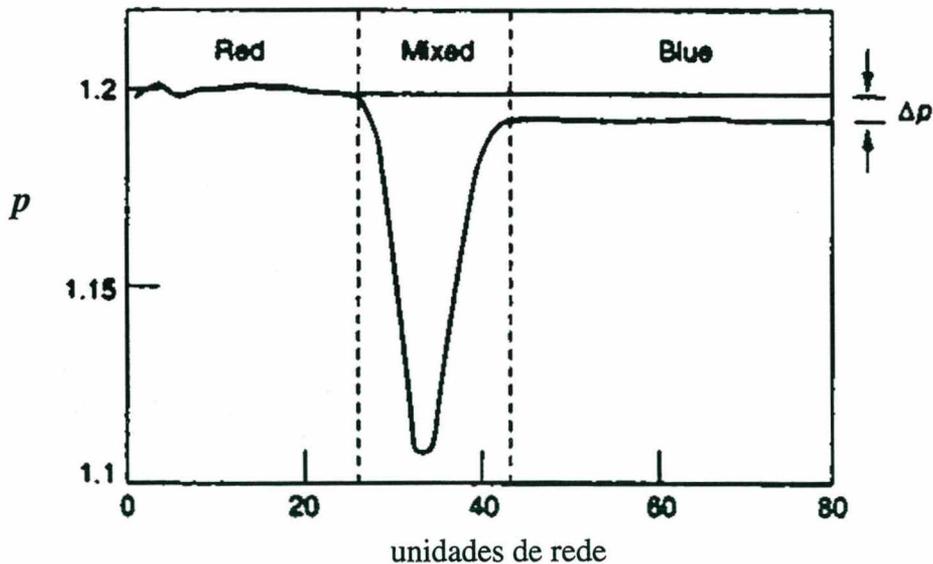


Figura 31 – Perfil de pressão de uma bolha

A acentuada queda de pressão que ocorre na interface é resultado do processo de separação de fases que tende afastar as partículas azuis das partículas vermelhas e vice-versa e,

desse modo, diminui o número de partículas na região de interface. Esse comportamento da interface não é privilégio do modelo apresentado nesta seção, comportamento semelhante é apresentado pelo modelo proposto na seção seguinte, onde é discutido.

6.4 – Modelo de gás em rede com mediadores

Nesta seção é proposto um novo modelo para simulação de escoamentos imiscíveis. As razões de se propor um novo modelo e as vantagens e desvantagens deste modelo são apresentadas no final da seção.

O modelo proposto tem como principal inovação em relação aos modelos apresentados a presença dos *mediadores*, que são as variáveis responsáveis pelo transporte das informações sobre a distribuição de cores na rede, de modo que estas informações estejam acessíveis localmente em qualquer ponto da rede.

Para caracterizar o estado de um sítio é necessário um conjunto de quatro variáveis booleanas: $r_i(\vec{X}, T)$ e $b_i(\vec{X}, T)$ indicam a presença ou ausência de partículas vermelhas e azuis, respectivamente; $m_i^r(\vec{X}, T)$ e $m_i^b(\vec{X}, T)$ indicam a presença ou ausência de mediadores vermelhos ou azuis. As variáveis booleanas r_i e b_i podem assumir os valores zero ou um, independentemente umas das outras, ou seja, é possível haver, simultaneamente, uma partícula azul e uma vermelha na mesma direção, no mesmo sítio.

A dinâmica do modelo pode ser dividida em cinco passos que serão vistos na seqüência: *colisão entre partículas de mesma cor, colisão entre partículas de cores distintas, interferência dos mediadores, emissão e aniquilação de mediadores, e propagação.*

i - *Colisão entre partículas de mesma cor*. As colisões são realizadas independentemente para partículas azuis e vermelhas, podendo ser utilizadas as mesmas regras de colisão dos modelos monofásicos. Chamando de r'_i e b'_i os estados resultantes deste processo, faz-se:

$$r'_i(\vec{X}, T) = r_i(\vec{X}, T) + \omega_i(\mathbf{r}(\vec{X}, T)), \quad (6.4.1)$$

$$b'_i(\vec{X}, T) = b_i(\vec{X}, T) + \omega_i(\mathbf{b}(\vec{X}, T)). \quad (6.4.2)$$

ii - *Colisão entre partículas de cores distintas*. Nesta etapa partículas azuis e vermelhas trocam de velocidade, conservando o número de partículas de cada cor e a quantidade de movimento total do sítio. Uma maneira eficiente de se realizar esta etapa é fazendo a troca entre partículas azuis e vermelhas sem se alterar a soma $r'_i + b'_i$ em cada direção, pois, assim conserva-se a quantidade de movimento, um exemplo desta etapa é apresentado na figura 32.

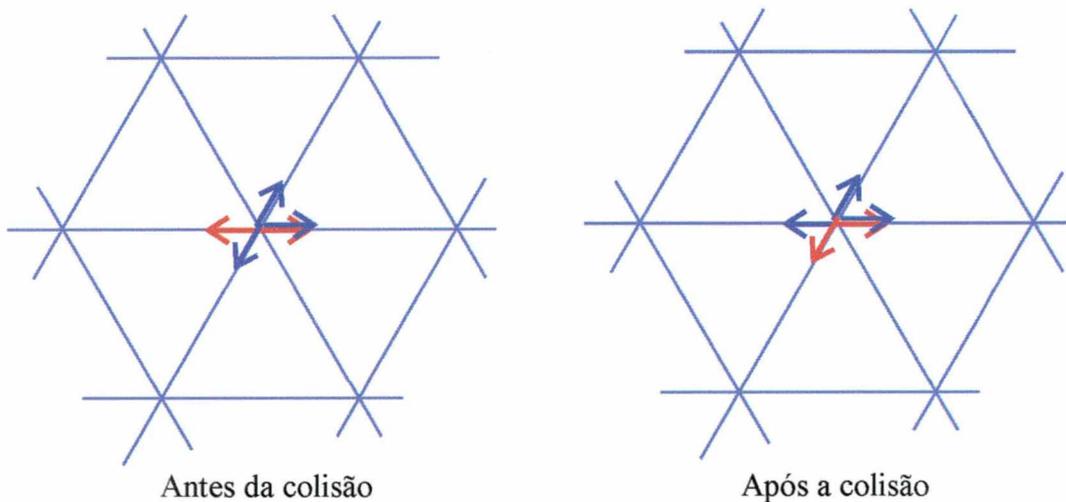


Figura 32 – Colisão entre partículas de cores distintas

Note que continuam existindo partículas nas mesmas direções antes e depois da colisão, somente as cores são alteradas.

iii – *Etapa de interferência dos mediadores*. Esta é a etapa responsável pela separação entre as partículas de cores diferentes. Os mediadores não interferem entre si e atuam somente

em partículas da sua cor, ou seja mediadores vermelhos agem somente em partículas vermelhas, e mediadores azuis agem somente em partículas azuis. Procedese da seguinte maneira: se um mediador vermelho encontra uma partícula de mesma cor em uma direção i , então, se não houver uma partícula vermelha em $-i$, a partícula tem o sentido de sua velocidade invertido, ou seja a partícula muda para a direção $-i$, e de modo análogo para as partículas e mediadores azuis. Na figura 33, abaixo, é apresentado um exemplo da interferência dos mediadores, representados pelas setas vazadas.

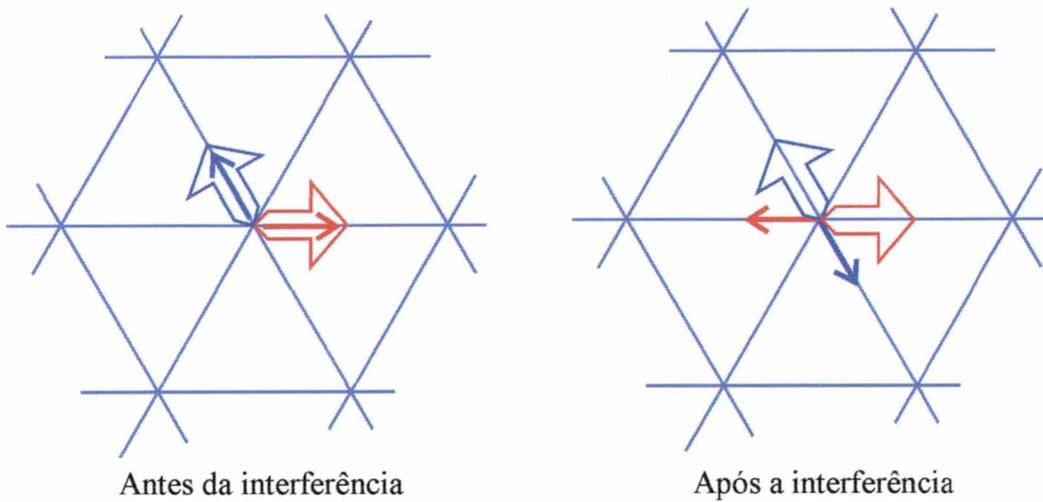


Figura 33 – Etapa de interferência dos mediadores

Chamando de r_i'' e b_i'' os estados após a interferência, pode-se escrever

$$r_i''(\vec{X}, T) = r_i'(\vec{X}, T) + \xi_i(\mathbf{r}', \mathbf{m}^r), \quad (6.4.3)$$

$$b_i''(\vec{X}, T) = b_i'(\vec{X}, T) + \xi_i(\mathbf{b}', \mathbf{m}^b); \quad (6.4.4)$$

onde a interferência dos mediadores é representada pelo operador ξ_i , que, por sua vez, pode ser escrito:

$$\xi_i(\mathbf{m}^r, \mathbf{r}) = m_{-i}^r(1 - m_i^r)(1 - r_i)r_{-i} - m_i^r(1 - m_{-i}^r)(1 - r_{-i})r_i. \quad (6.4.5)$$

Nesta etapa a quantidade de movimento não é conservada, isso será discutido mais adiante, no fim desta seção.

iv – *Etapa de emissão e aniquilação de mediadores.* Como o objetivo do modelo é a obtenção de um comportamento de fluidos imiscíveis, faz-se a emissão dos mediadores vermelhos sempre que o número de partículas vermelhas for maior que o número de partículas azuis, e emite-se mediadores azuis sempre que o número de partículas azuis for maior que o número de vermelhas. Ou seja:

$$\sum_i r_i(\vec{X}, T) > \sum_i b_i(\vec{X}, T) \Rightarrow m_i^r(\vec{X}, T) = 1 \text{ para } i = 1, \dots, b \text{ e} \quad (6.4.6)$$

$$\sum_i r_i(\vec{X}, T) < \sum_i b_i(\vec{X}, T) \Rightarrow m_i^b(\vec{X}, T) = 1 \text{ para } i = 1, \dots, b. \quad (6.4.7)$$

A aniquilação de mediadores de uma determinada cor pode ocorrer quando em um sítio não houver partículas desta cor, estando esta condição presente a aniquilação ocorre com uma probabilidade P_{aniq} . A probabilidade de aniquilação P_{aniq} permite que se controle a distância de interação entre as partículas de uma mesma cor, o que é bastante importante quando se deseja a simulação de fenômenos como coalescência e separação de fases.

v – *Etapa de propagação.* Tanto as partículas como os mediadores são propagados para os sítios vizinhos da mesma forma como nos modelos já vistos:

$$r_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = r_i^r(\vec{X}, T), \quad (6.4.8)$$

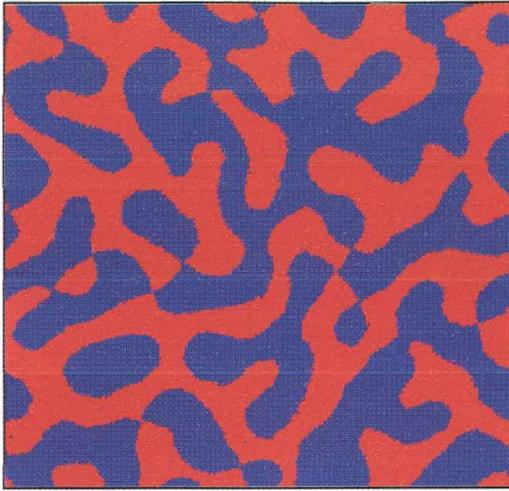
$$b_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = b_i^b(\vec{X}, T), \quad (6.4.9)$$

$$m_i^r(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = m_i^r(\vec{X}, T), \quad (6.4.10)$$

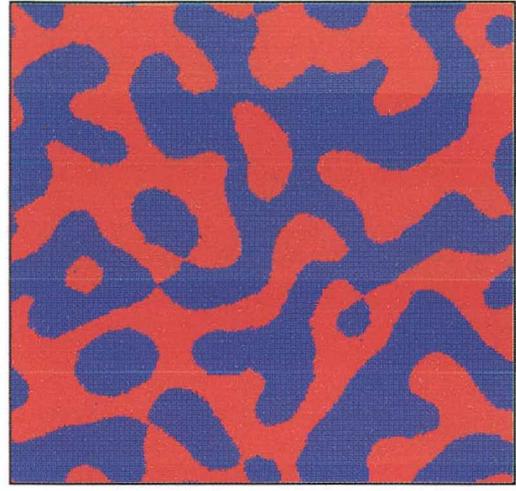
$$m_i^b(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = m_i^b(\vec{X}, T). \quad (6.4.11)$$

Com esta etapa completa-se, então, um passo de tempo na atualização do modelo.

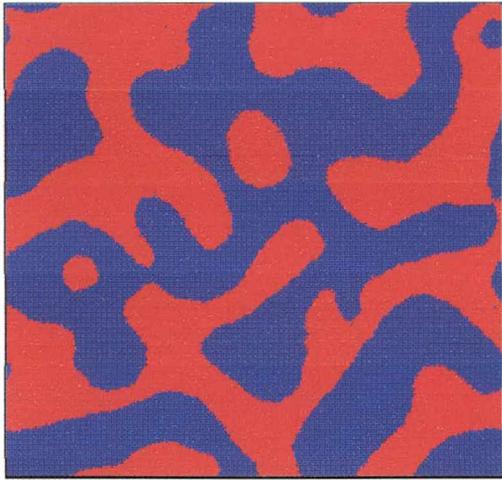
De modo análogo ao que foi apresentado para os outros modelos, foram realizadas simulações de separação de fases. Na figura 34 é apresentado o resultado de uma dessas simulações. A concentração é de 50% de partículas de cada tipo, como nos outros modelos.



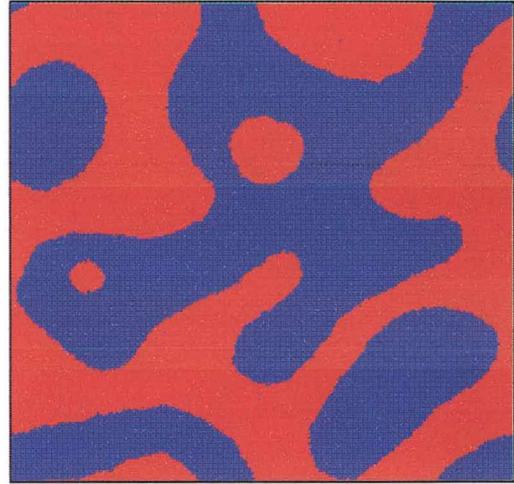
800 passos



1200 passos



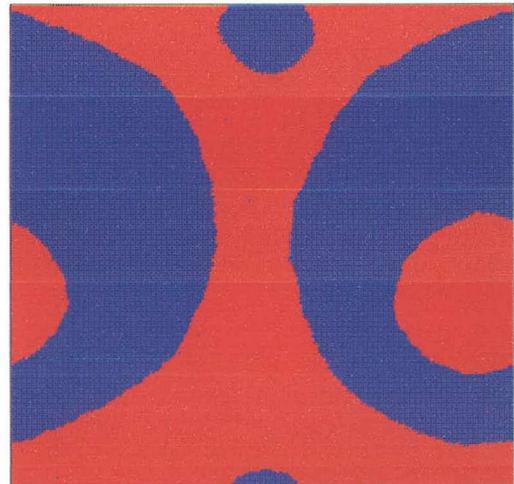
2000 passos



8000 passos



8000 passos



40000 passos

Figura 34 – Separação de fases no modelo com mediadores

É interessante notar que padrões bastante semelhantes são obtidos nas simulações realizadas com os três modelos, apesar de suas diferenças no que concerne à dinâmica microscópica. Isso demonstra que os padrões de comportamento macroscópico são, muitas vezes, pouco sensíveis aos detalhes da dinâmica microscópica.

Foram realizadas simulações mostrando que o modelo proposto nesta seção se comporta de acordo com a Lei de Laplace. O resultado destas simulações está no gráfico apresentado abaixo.

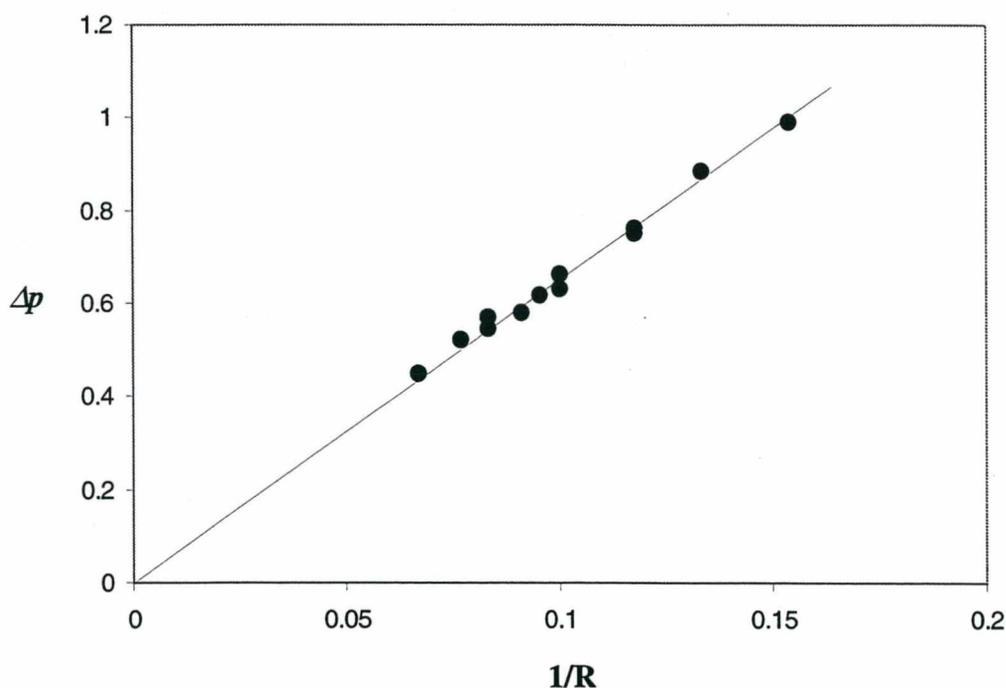


Figura 35 – Verificação da Lei de Laplace

O modelo proposto nesta seção apresenta também uma queda de densidade na interface. O perfil de densidade é análogo ao perfil de pressão apresentado na seção anterior, e é mostrado na figura 36.

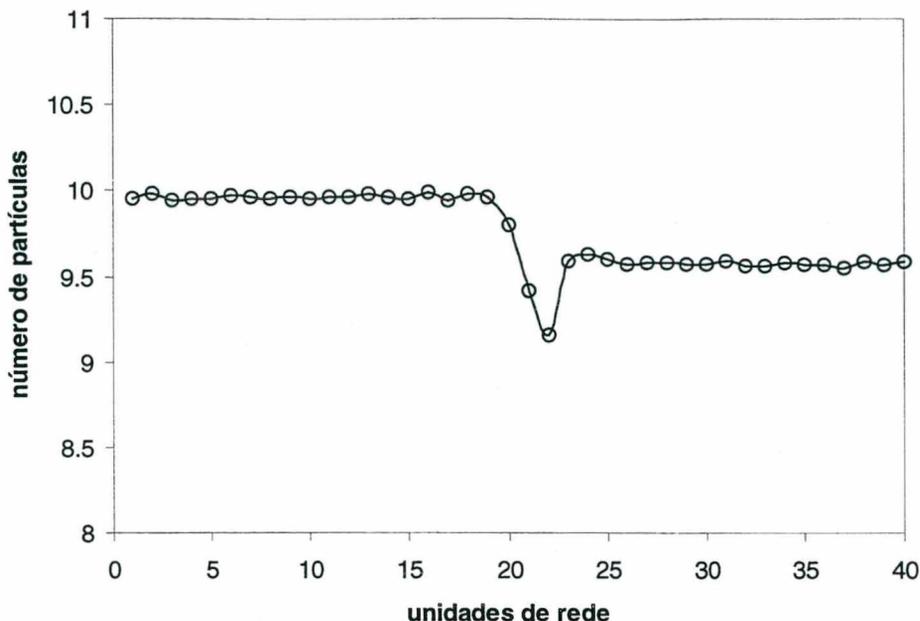


Figura 36 - variação do número de partículas

Esta queda de densidade (e conseqüentemente da pressão) na interface que aparece devido à atração dos mediadores neste modelo e devido à repulsão provocada pelos buracos no modelo proposto por Chen et al. pode ser vista como um efeito do campo que, ao atrair as partículas vermelhas para fase vermelha e as partículas azuis para a fase azul, cria uma região onde a densidade cai abruptamente. Em uma interface real um efeito como este não é facilmente observável, embora não seja possível afirmar que não ocorra. Por lado, este efeito aparece de forma bastante acentuada nos modelos de rede devido à espessura considerável da interface quando comparada com as dimensões de rede normalmente utilizadas.

Entre as características distintivas do modelo proposto nesta seção uma merece uma análise detalhada. Na etapa intitulada de *interferência dos mediadores* que é a principal etapa, responsável pela separação entre os diferentes tipos de partículas, não há conservação da quantidade de movimento. O fato de não haver conservação local era esperado pelo efeito da interação entre as partículas ocasionada pela presença dos mediadores, que simulam a presença de um campo de força. Um sistema de partículas isolado, entretanto, deve conservar a quantidade de movimento total, e por uma questão de simetria, é de se esperar que isto ocorra também no modelo, desde que haja um número suficientemente grande de partículas (uma rede

suficientemente grande) ou que se considere uma média entre diversos passos de tempo. Diversas simulações foram realizadas confirmando esta hipótese, na figura 37, abaixo, é apresentado um gráfico onde são mostradas as variações da quantidade de movimento na direção x de um sistema isolado (um cubo de aresta de 50 unidades de rede) em diversos passos de tempo.

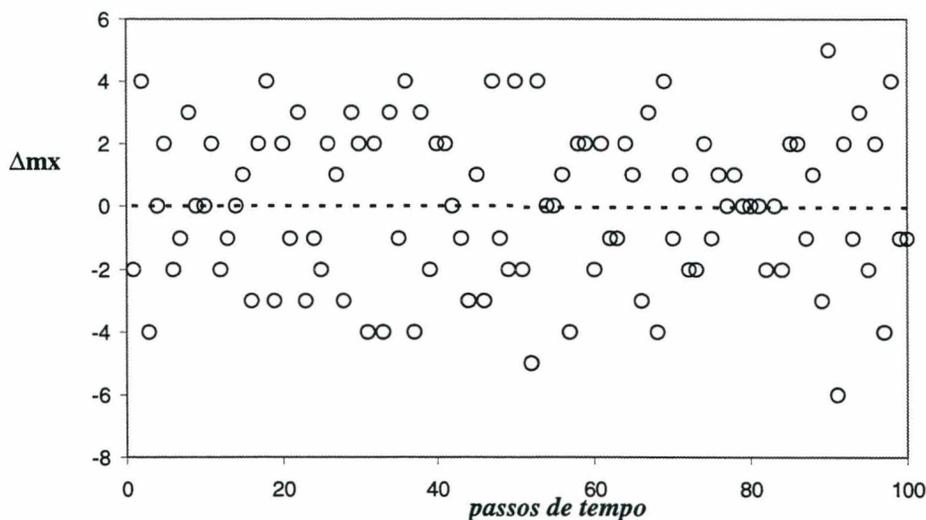


Figura 37 – Variação da quantidade de movimento a cada passo de tempo e valor médio da variação

Os pontos no gráfico representam a variação a cada passo da quantidade de movimento e a linha tracejada é o valor médio desta variação que, como foi dito, é nulo. Os gráficos para as direções y e z são análogos.

Outra questão a ser discutida são as vantagens e desvantagens que o modelo proposto apresenta em relação aos modelos anteriores. Primeiramente, assim como o modelo proposto por Chen et al. o modelo com mediadores tem a vantagem de ser um modelo local. Isto torna o modelo adequado ao uso de computação paralela, e evitando a etapa de consulta aos vizinhos, torna a simulação mais rápida. Outra característica importante é a ausência de uma etapa de maximização que é uma etapa bastante demorada, principalmente para os modelos 3D quando o número de estados possíveis é muito grande. Além disso a separação das colisões em duas

etapas, colisão entre partículas de mesma cor e colisão entre partículas de cores distintas, permite que se altere separadamente a difusividade e as viscosidades de cada fluido. Por fim a possibilidade de alteração da probabilidade de aniquilação P_{aniq} permite o controle da distância de interação de um fluido e o controle da tensão interfacial. Essas vantagens são obtidas às custas de aumento do consumo de memória que é pelo menos duas vezes superior ao dos modelos anteriores.

Outro ponto a ser considerado é que o modelo com mediadores pode ser facilmente estendido para a simulação mais de dois fluidos e também pode ser estendido para a simulação de transições de fase e microemulsões.

6.5 – Comentários sobre o comportamento da interface

Como foi dito na seção 6.1 algumas condições devem ser satisfeitas quando se pretende a descrição macroscópica de uma interface. Para a velocidade tem-se as condições: i - a velocidade normal à interface e junto desta deve ser igual à velocidade da interface; ii - a velocidade tangencial junto à interface nas duas fases deve ser igual.

O que ocorre quando se tenta aplicar estas condições aos modelos de gás em rede? O primeiro ponto a ser considerado é que a interface tem, neste caso, uma espessura finita de algumas unidades de rede. Isso provoca algumas dificuldades na descrição macroscópica, o que, entretanto, não deve ser considerado como uma falha do modelo. Deve ser levado em consideração que do ponto de vista microscópico toda interface tem uma espessura finita de (pelo menos) algumas vezes o comprimento de interação das moléculas. Uma tentativa de se aplicar as condições i e ii a um problema de dimensões não muito maiores que este comprimento de interação resultaria, naturalmente, em inconsistências, na realidade tal tentativa seria análoga à tentativa de se utilizar a mecânica do contínuo em um problema de Knudsen. Uma boa dose de

cautela é portanto necessária quando se procura verificar se as condições i e ii são satisfeitas nos modelos de gás rede.

Primeiramente analisemos a primeira das condições. Quando se observa passo a passo o comportamento de um gás em rede junto a uma interface nota-se que esta condição, a primeira vista, nunca é satisfeita pois as flutuações de velocidade de um passo de tempo a outro e de um sítio a outro são muito grandes. Além disso, a dimensão finita da interface causa ambigüidades em uma determinação precisa do que é um ponto junto a interface. Quando porém são realizadas médias temporais e espaciais, ou seja, quando são alteradas as escalas de tempo e espaço em que se analisa a questão, é possível ver que esta condição é satisfeita. Caso contrário, ou seja, se esta condição não for satisfeita as densidades dentro de cada fase (mais especificamente as densidades médias em cada fase junto a interface) seriam alteradas com o movimento da interface, o que não ocorre.

A tentativa de verificação da condição ii é mais problemática, pois desde que existam gradientes tangenciais de velocidade na interface ou, mais especificamente, através da interface, já que esta tem uma espessura finita, não há porque a velocidade em um lado da interface ser igual à velocidade no outro lado. Na realidade a condição ii tem aplicação (como já foi comentado) somente quando a interface é considerada com espessura nula.

Resultados de simulação de campos de velocidade na interface são apresentados e discutidos na seção seguinte.

CAPÍTULO 7 - MODELO COM MEDIADORES - RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados resultados de simulações que comprovam a viabilidade de se utilizar o modelo proposto neste trabalho para se prever o comportamento de escoamentos de fluidos imiscíveis. Todos os resultados apresentados neste capítulo foram obtidos a partir da utilização do modelo com mediadores em uma rede FCHC (nos casos bidimensionais esta rede é projetada no plano).

Primeiramente, para demonstrar a isotropia do modelo foi realizada a simulação apresentada nas figuras 38-43. Nesta simulação uma porção de um fluido (em verde na figura), na forma de um cubo, é colocada no interior de um outro fluido (transparente na figura), evoluindo para a forma de uma esfera. Foi utilizada uma rede de $60 \times 60 \times 60$ unidades de rede, a aresta do cubo possui 20 unidades de rede e o tempo total de simulação foi em torno de 460 minutos utilizando um microcomputador com processador Pentium de 300 MHz (aproximadamente 47000 sítios são atualizados em um passo a cada segundo).

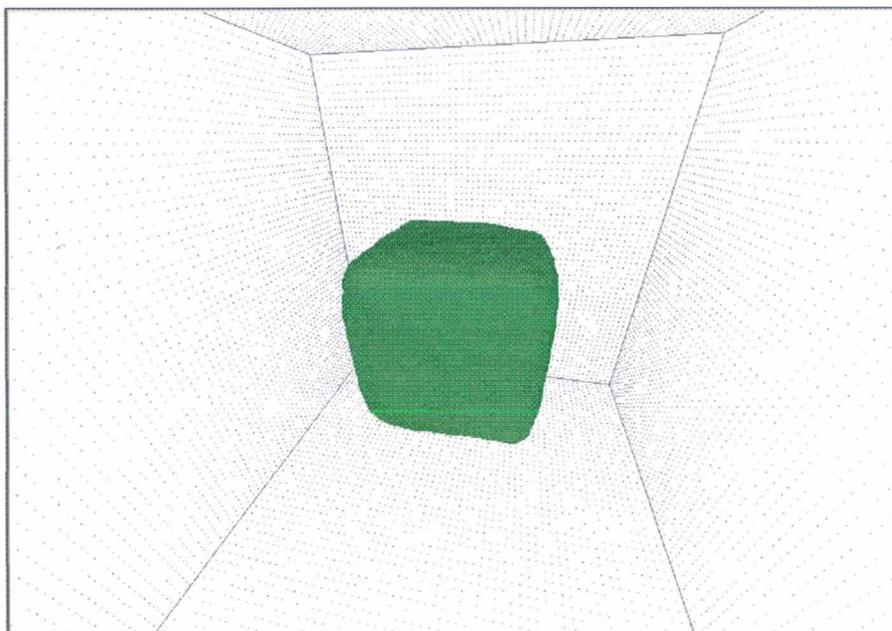


Figura 38 – Média dos dez primeiros passos.

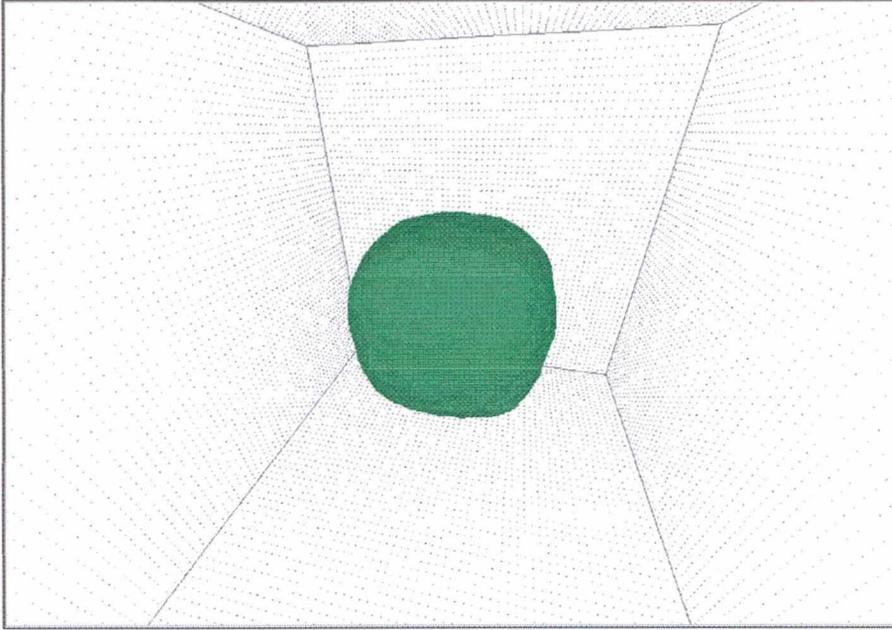


Figura 39 – Após 60 passos - 30 passos de média temporal

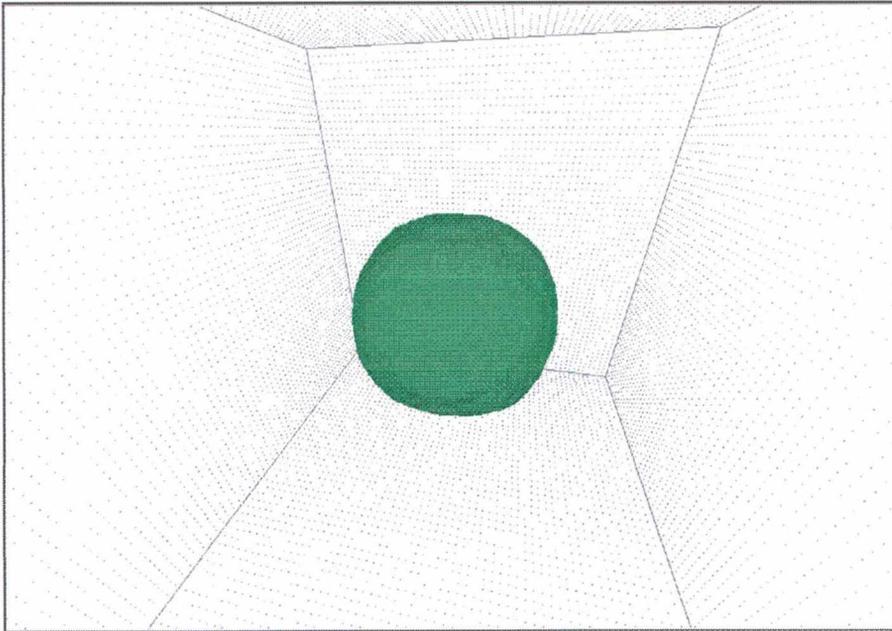


Figura 40 – Após 120 passos - 30 passos de média temporal

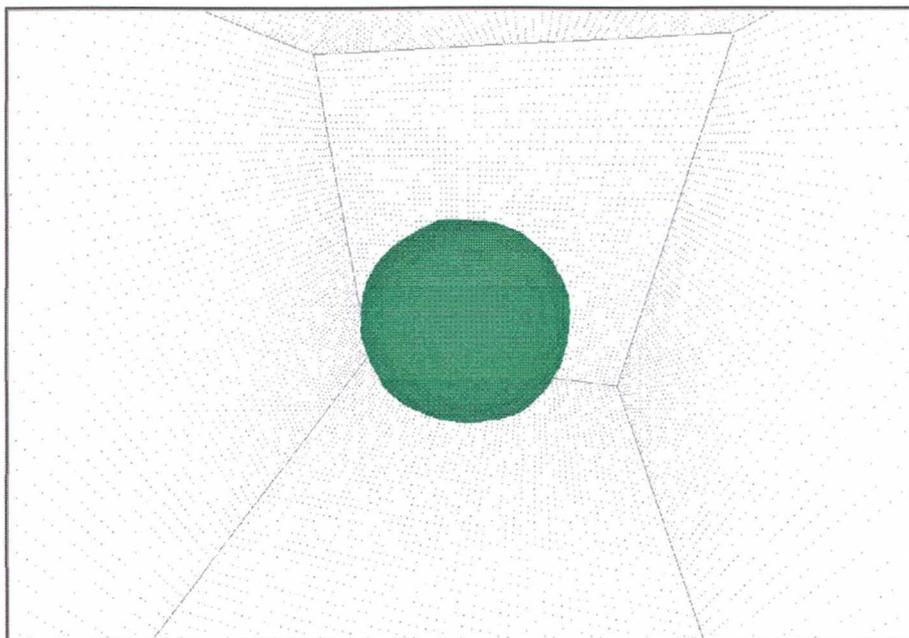


Figura 41 – Após 240 passos - 30 passos de média temporal

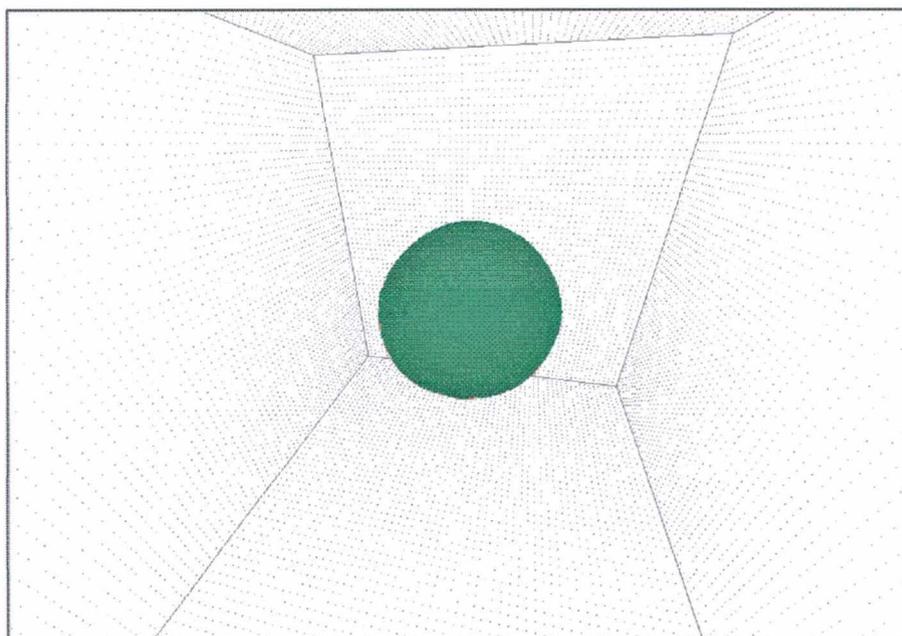


Figura 42 – Após 1200 passos - 200 passos de média temporal

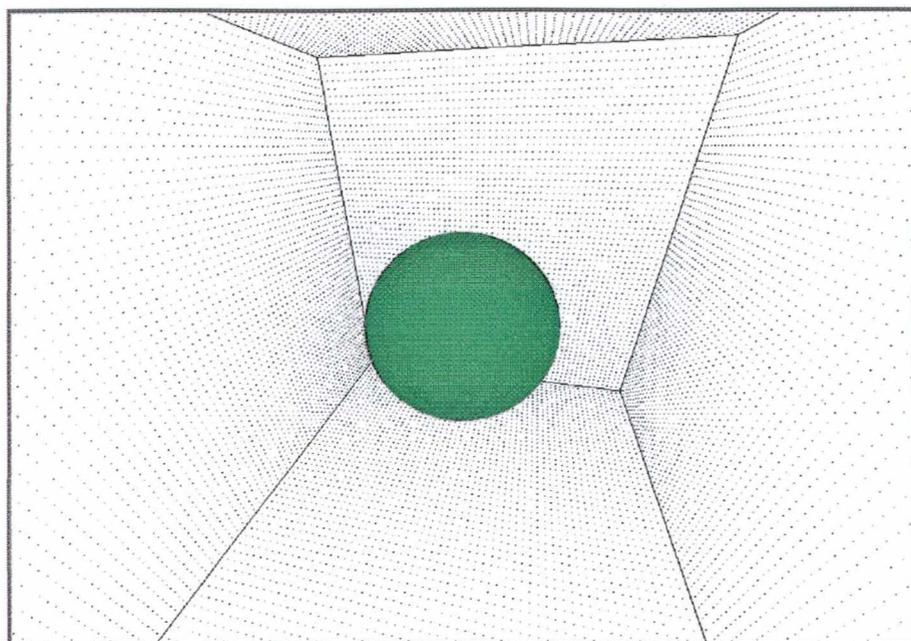


Figura 43 – Após 6000 passos - 1000 passos de média temporal

Nas simulações de escoamentos de fluidos imiscíveis em contato com superfícies sólidas é de extrema importância o ângulo entre a interface dos fluidos e o sólido. Este ângulo é resultado da diferença entre as interações de cada fluido com a parede e está na base do fenômeno da capilaridade. O modelo com mediadores pode simular diferentes ângulos de contato, para isso controla-se a reflexão dos mediadores em colisões com superfícies sólidas, quando os mediadores vermelhos são refletidos pela parede, enquanto os azuis não interagem com ela, o fluido vermelho comporta-se como *fluido molhante* e o fluido azul comporta *não-molhante* e vice-versa. É possível, também, atribuir-se uma *probabilidade de reflexão* para os mediadores azuis e vermelhos e com isso controlar o ângulo de contato. Na seqüência (figuras 44 e 45) são apresentadas duas simulações, na superior os mediadores vermelhos têm uma probabilidade de reflexão maior do que os mediadores azuis e na inferior temos a situação inversa.

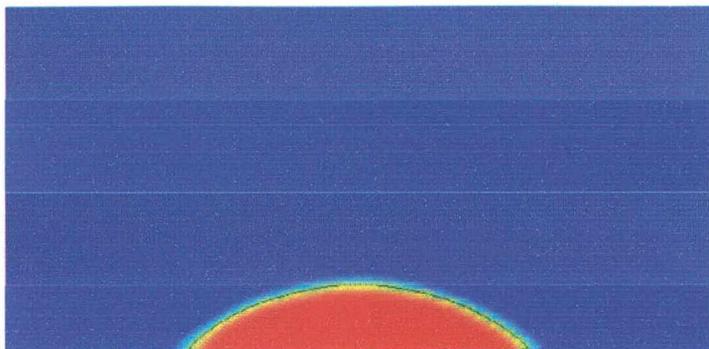


Figura 44 – Ângulo de contato – vermelho molhante

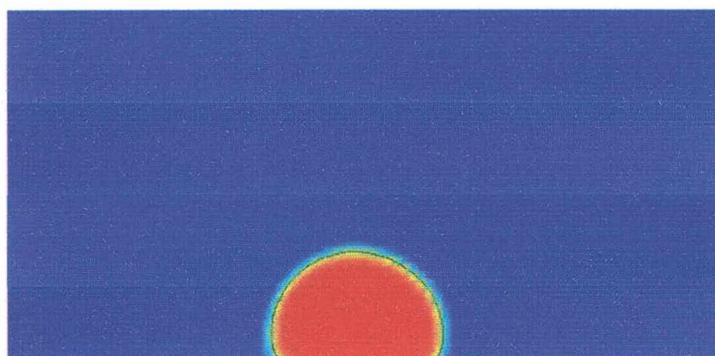


Figura 45 – Ângulo de contato – vermelho não-molhante

Quando um fluido molhante encontra uma parede vertical ele sobe pela parede até uma altura h . Esta altura h e a forma da interface podem ser determinadas analiticamente a partir do conhecimento da tensão interfacial σ , da aceleração da gravidade \vec{g} e da densidade ρ , uma solução é apresentada em [Batchelor 1967]. Utilizando a equação de Laplace (6.1.4) pode-se determinar a tensão interfacial e, a partir disso, é possível a comparação entre simulação e resultado previsto teoricamente.

Em seguida, na figura 46, é apresentado o resultado de uma simulação e na figura 47 é apresentada a comparação desta simulação com o resultado previsto teoricamente. A tensão interfacial obtida do resultados apresentados na figura 35 (capítulo 6) é igual a 6 (em unidades de rede), a aceleração imposta foi de aproximadamente 10^{-3} (também em unidades de rede). Foi utilizada uma rede 300 por 300 unidades de rede (na figura é mostrada apenas parte da rede) o

tempo de simulação necessário até o sistema se estabilizasse foi de cerca de 60 horas (em um PC com processador Pentim 300 MHz).

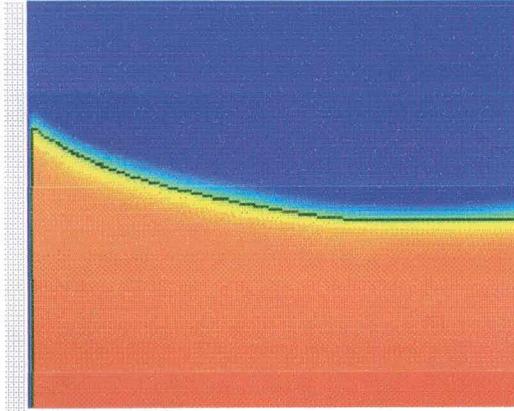


Figura 46 – Ascensão de um fluido molhante em contato com uma parede

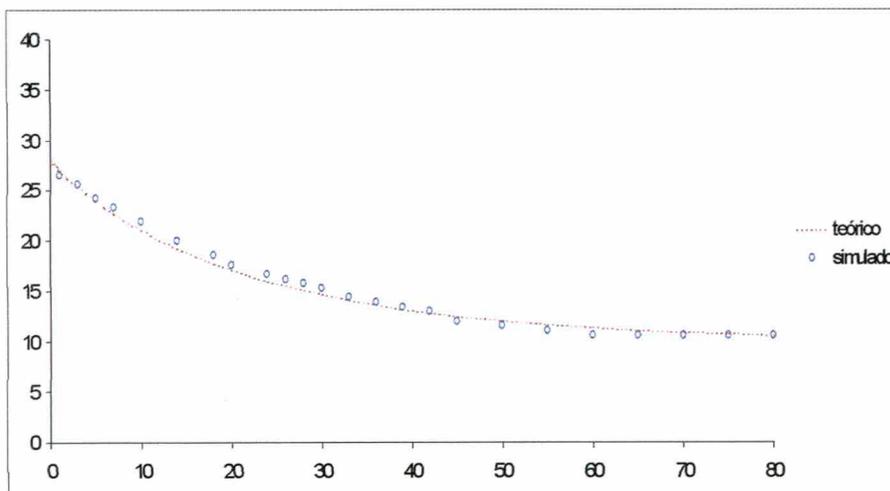


Figura 47 – Comparação da simulação da figura anterior com a previsão teórica

Como pode ser observado na figura 47, não apenas qualitativamente, mas também quantitativamente os resultados simulados aproximam-se bastante dos resultados previstos.

Dando prosseguimento a simulações de interação de fluidos com superfícies sólidas, é apresentado na seqüência, figura 48, o resultado de um processo de invasão de um tubo capilar por um fluido molhante. A altura prevista para ascensão do fluido molhante calculada a partir do ângulo de contato, da tensão interfacial e da aceleração da gravidade também é apresentada na figura.

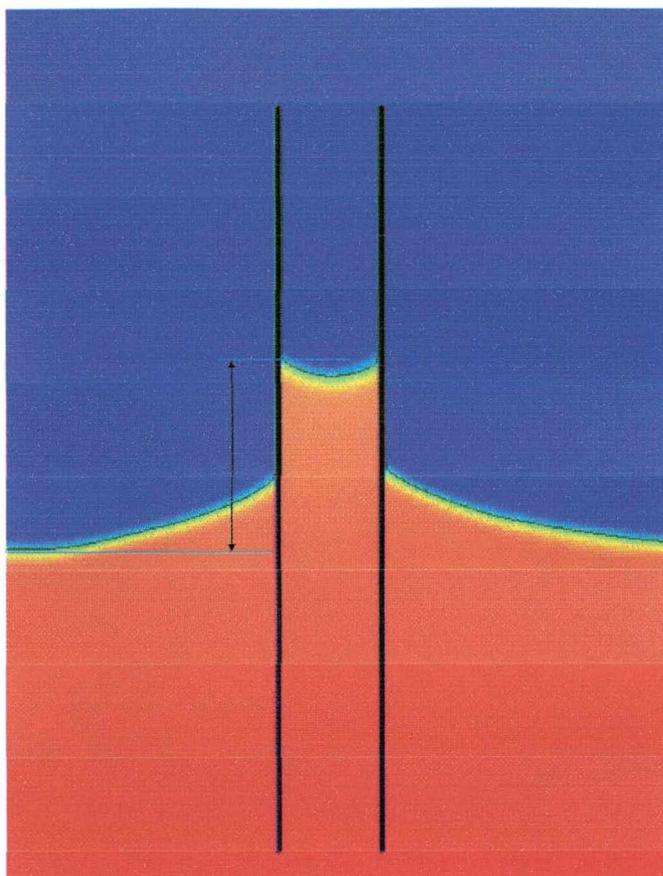


Figura 48 – Ascensão capilar: comparação entre previsão teórica e simulação

Na simulação apresentada acima esperou-se até que passasse o transitório, para isso foram necessários 200000 passos (cerca de 50 horas em pentium II 333MHz). Entretanto uma das utilizações mais interessantes dos modelos em gás em rede é a possibilidade de visualização da dinâmica de processos de invasão. Nas imagens na seqüência é apresentado o transitório da invasão apresentada na figura 48.

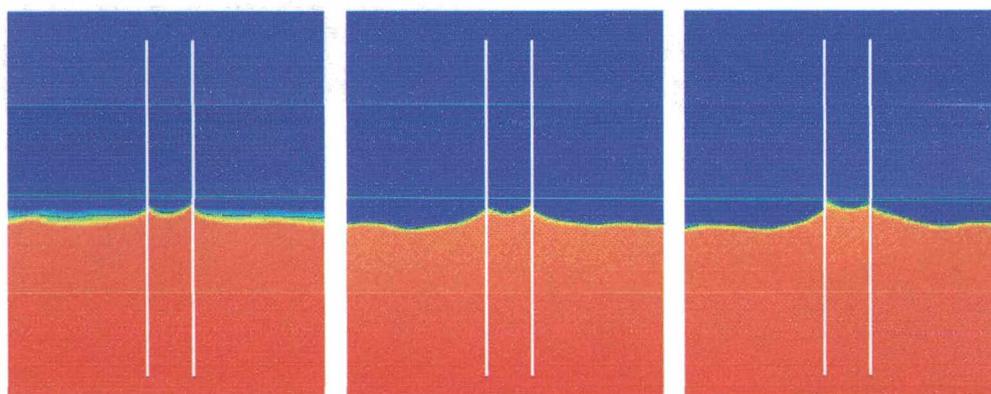


Figura 49 – Invasão capilar após 400, 800 e 1200 passos

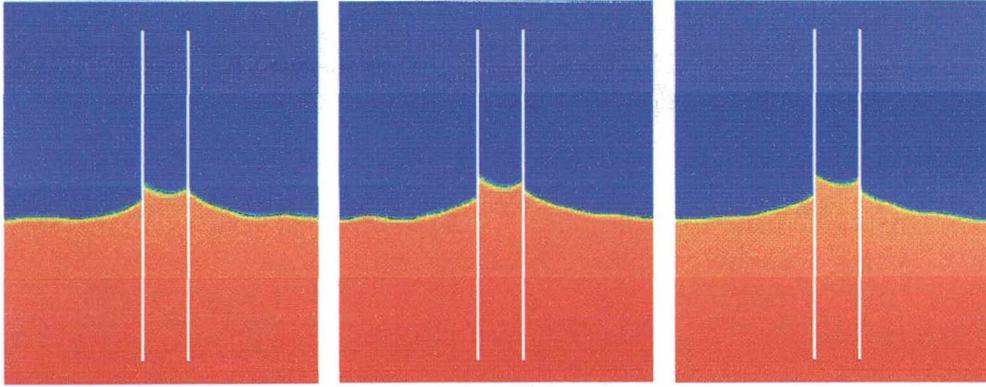


Figura 50 – Invasão capilar após 1600, 2000 e 2400 passos

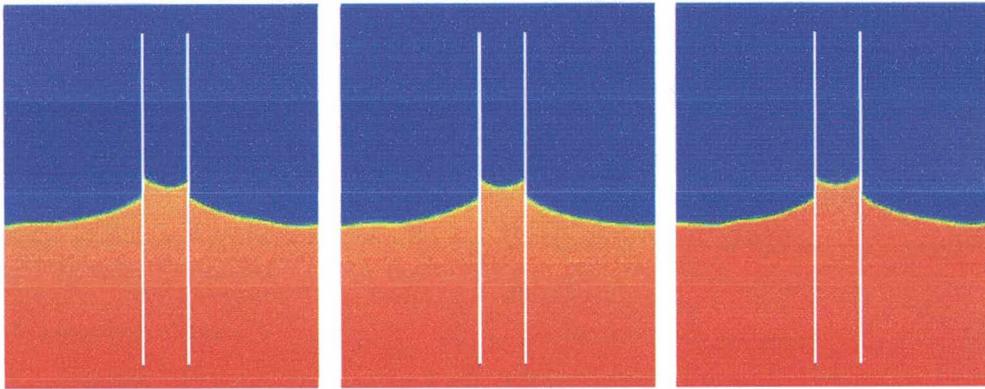


Figura 51 – Invasão capilar após 2800, 3200 e 3600 passos

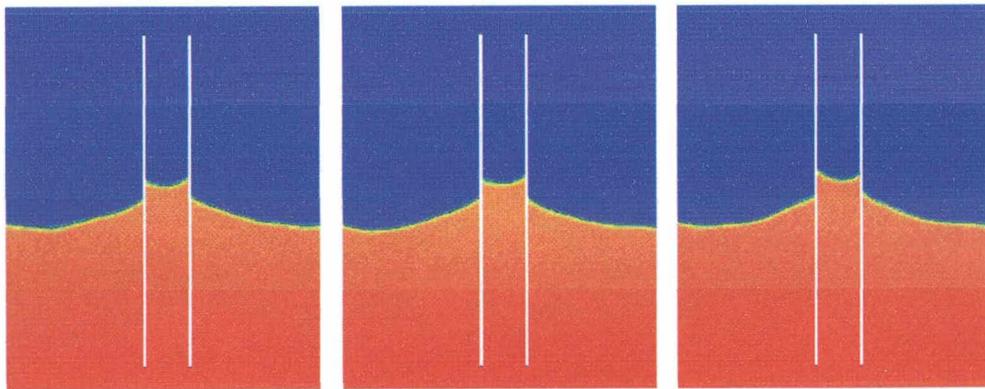


Figura 52 – Invasão capilar após 4000, 4400 e 4800 passos

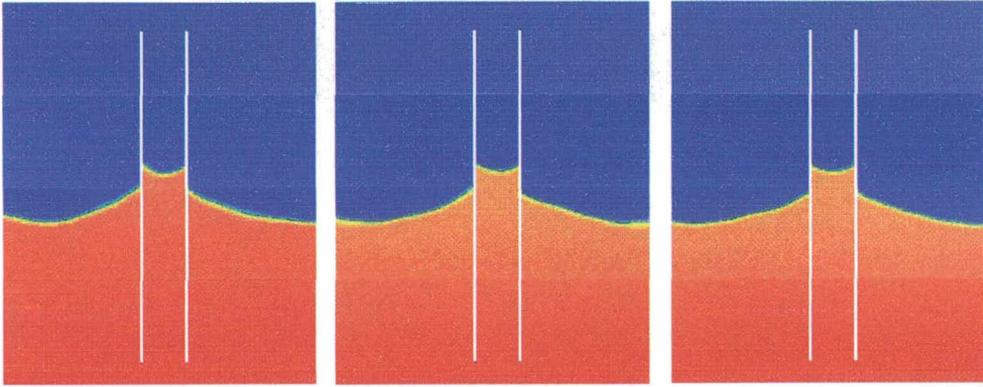


Figura 53 – Invasão capilar após 5200, 5600 e 6000 passos

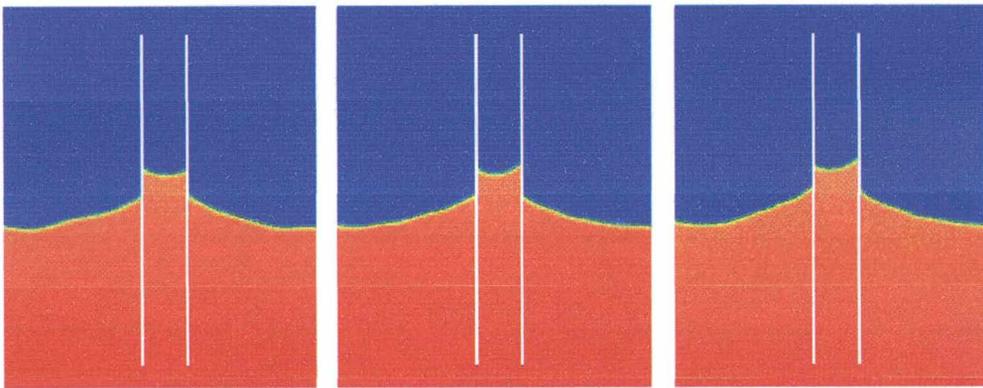


Figura 54 – Invasão capilar após 6400, 6800 e 7200 passos

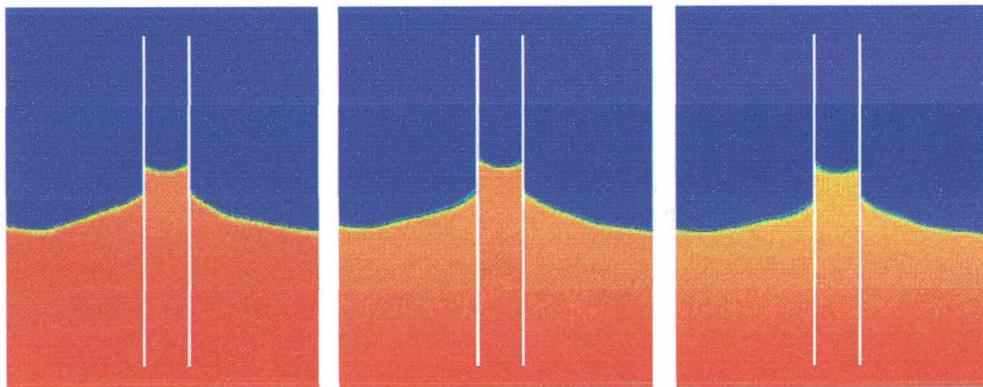


Figura 55 – Invasão capilar após 7600, 8000 e 8400 passos

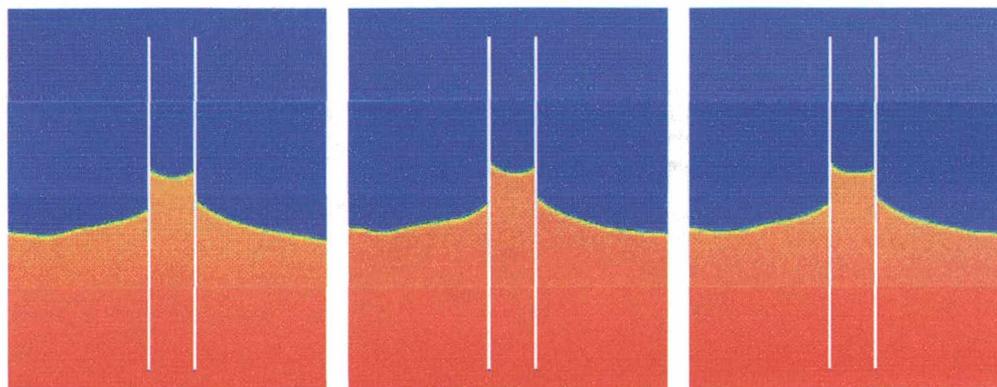


Figura 56 – Invasão capilar após 8800, 9200 e 9600 passos

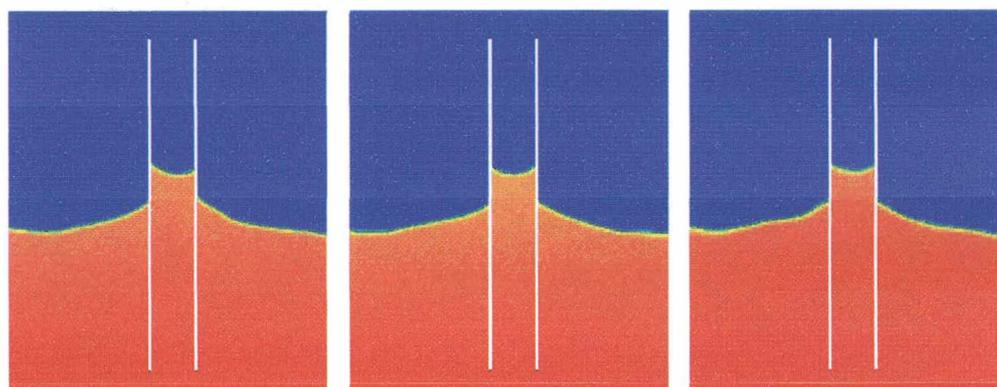


Figura 57 – Invasão capilar após 10000, 10400 e 10800 passos

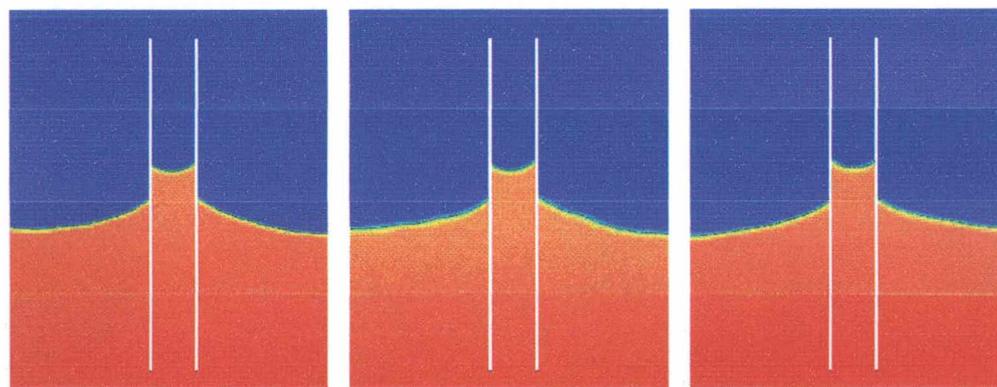


Figura 58 – Invasão capilar após 11200, 11600 e 12000 passos

Como foi comentado anteriormente, a utilização de modelos de gás em rede permite a simulação de escoamentos em estruturas de geometria complexas sem que isso represente nenhuma dificuldade adicional. Como exemplo é mostrado na figura 59 uma simulação de

invasão de um meio poroso bidimensional por fluido molhante que sofre a ação de uma força de campo.

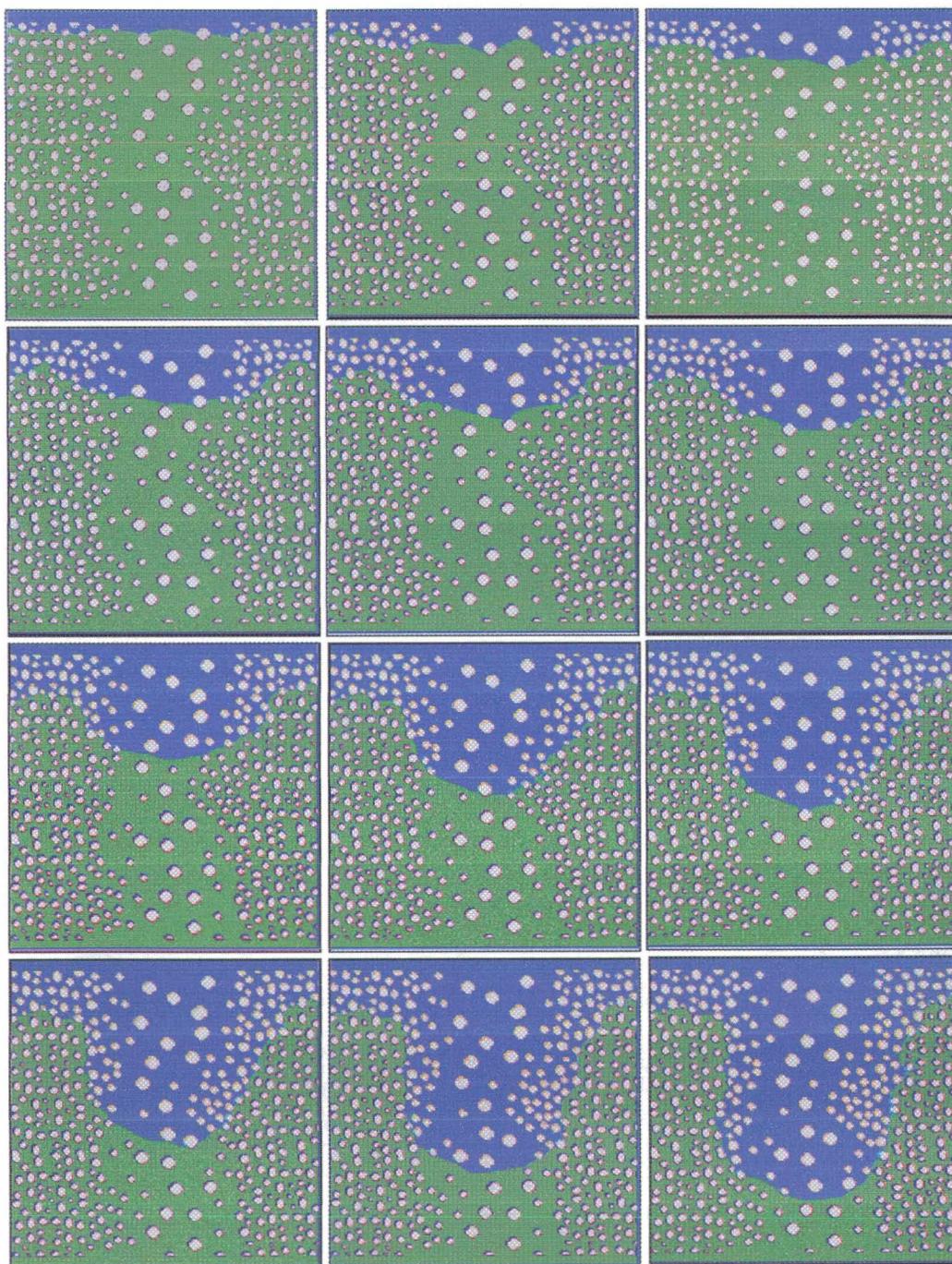


Figura 59 – Invasão de um meio poroso bidimensional

Diversos artigos foram publicados apresentando resultados de simulações de separação de fases utilizando modelos de gás em rede [Alexander et al. 1993], [Chen et al. 1991], [Rothman et al. 1988]. Este fenômeno ocorre quando uma mistura é instável e segrega-se espontaneamente em duas ou mais fases. A instabilidade da qual resulta segregação pode ser uma diferença de concentração localizada que resulta num processo conhecido como *nucleação*. Quando a instabilidade é não localizada e de amplitude infinitesimal tem-se um processo conhecido como *decomposição spinodal*. As flutuações inerentes aos modelos de gás em rede booleanos faz com que eles sejam adequados às simulações de decomposição spinodal. Na seqüência (figuras 60 e 61) são apresentados os resultados de uma dessas simulações, uma rede de 256x256 é inicializada com uma mistura homogênea do fluido vermelho e azul, os pontos em verde representam os sítios onde a concentração de partículas azuis e vermelhas é próxima.

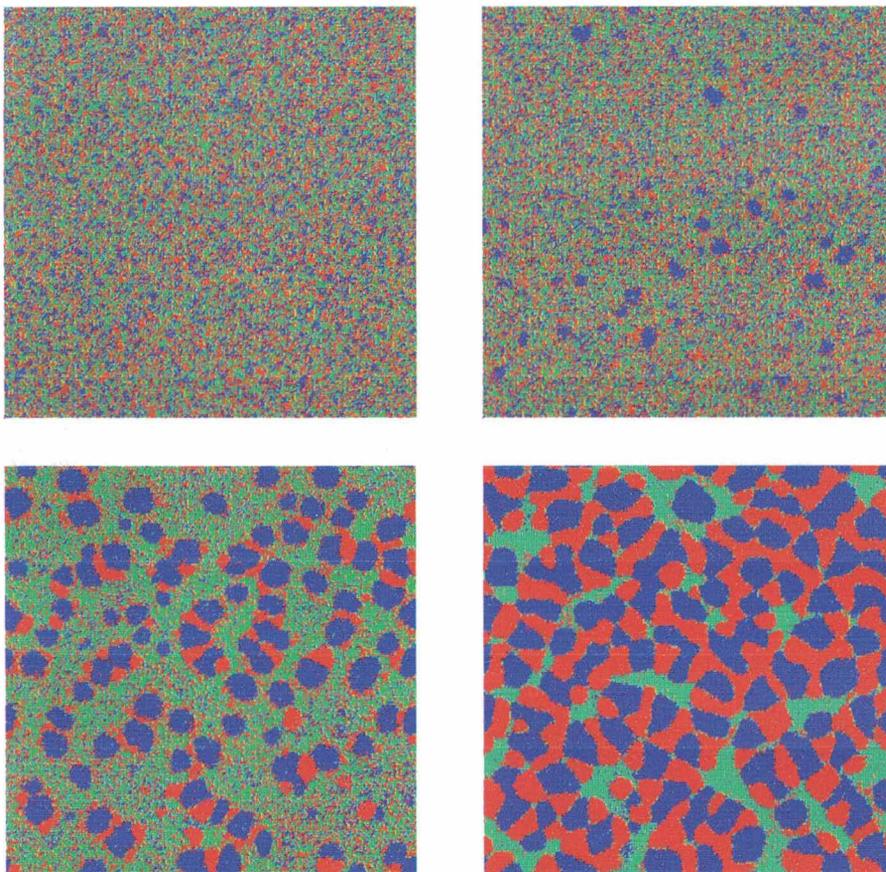


Figura 60 – Separação de fases: 10, 50, 100 e 200 passos

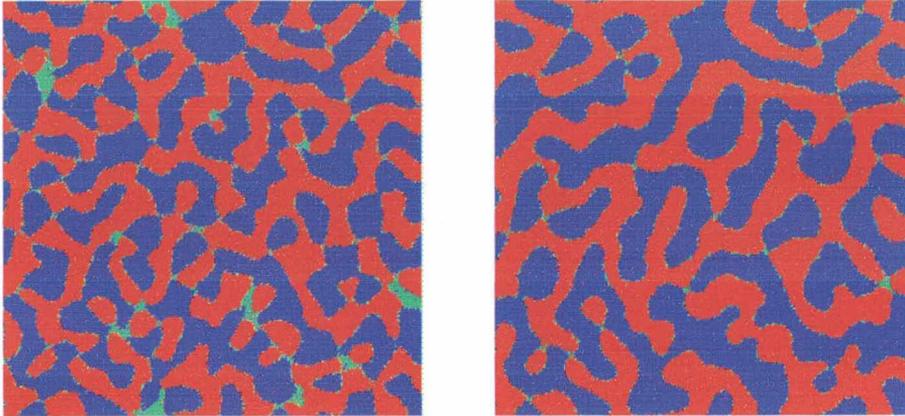


Figura 61 – Separação de fases 300 e 500 passos

É necessário ressaltar que em simulações de processos complexos como a segregação de fases os modelos de gás de rede são utilizados como um laboratório onde, através das simulações se procura compreender como se processa e quais os fatores que influem no processo, em outras palavras, as simulações são, neste caso sobretudo, uma ferramenta que auxilia na compreensão do fenômeno, e não uma ferramenta de cálculo.

A processo de coalescência é um outro exemplo de um fenômeno complexo que pode ser simulado através da uso de modelos de gás em rede. Alguns resultados são apresentados na seqüência (figuras 62, 63 e 64).

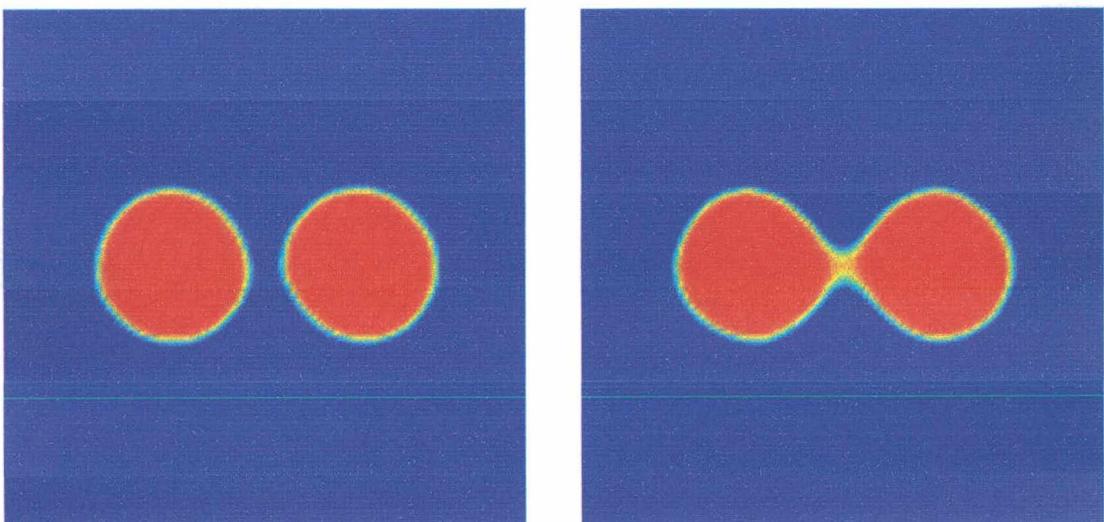


Figura 62 – Coalescência. Condição inicial e após 400 passos

É importante, mais uma vez, enfatizar que o modelo de gás em rede com a utilização de mediadores é bastante adequado para simular fenômenos como o apresentado acima, pois permite o controle da distância de interação. Nas figuras 63 e 64, abaixo, é apresentada a seqüência da simulação.

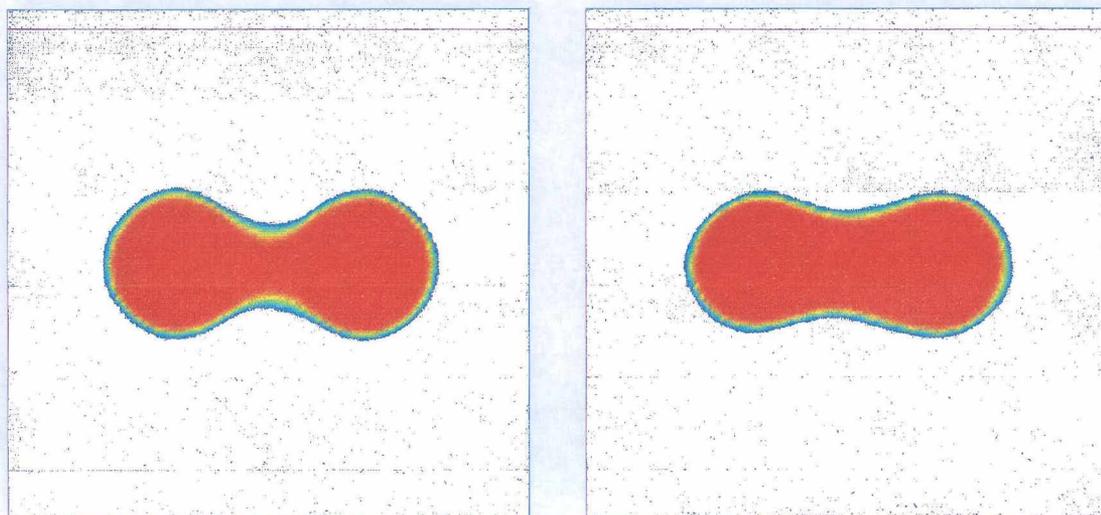


Figura 63 – Coalescência: 600 passos e 800 passos

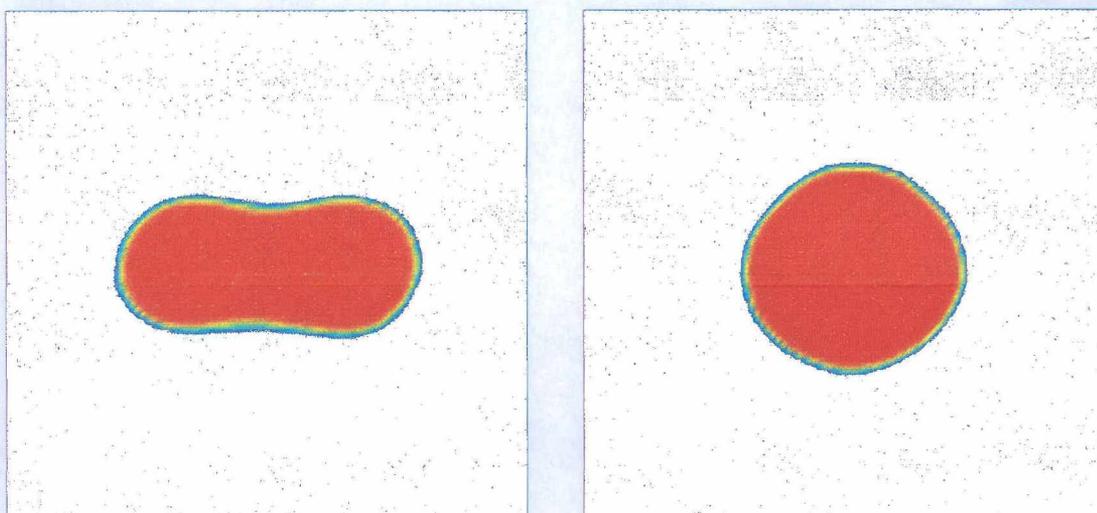


Figura 64 – Coalescência: 1000 passos e 3600 passos

A dinâmica microscópica dos processos de separação de fases e coalescência nos modelos apresentados merece uma análise mais detalhada. Considere uma mistura homogênea com uma maior concentração de partículas azuis. Um sistema deste tipo evolui no sentido da

segregação entre as fases azul e vermelha, o que provoca esta separação são forças de atração a curta distância [Rothman & Keller 1988] que, embora provocadas por diferentes mecanismos nos diferentes modelos, resultam num processo semelhante. No caso de uma maior concentração de partículas azuis este processo resulta na formação de bolhas vermelhas separadas por regiões de partículas azuis. A mistura entre as partículas azuis e vermelhas fica confinada, após um certo tempo, às regiões de interface entre as bolhas vermelhas e a região azul, como na figura 65.

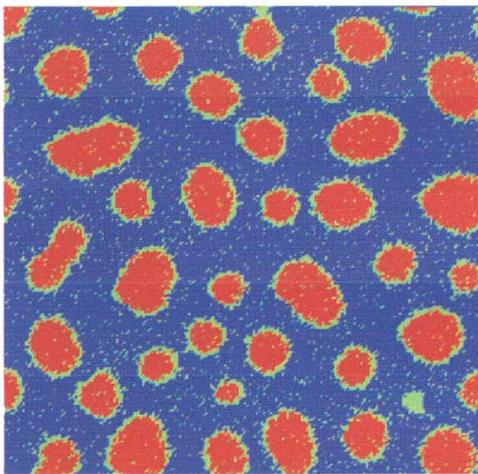


Figura 65 -. Separação de fases, com concentração de 30% de partículas vermelhas

A partir deste ponto começa o processo de coalescência entre bolhas vermelhas, neste ponto o modelos apresentados podem apresentar comportamentos distintos.

Primeiramente considere o modelo proposto por Rothman & Keller, neste caso as forças que promovem a separação entre as fases possuem um alcance máximo de apenas uma unidade de rede, pois somente os primeiros vizinhos influem no comportamento das partículas de um sítio. Deste modo duas bolhas próximas não iniciam um processo de coalescência, a não ser que, levadas pelo movimento do fluido, estas bolhas se encontrem.

No modelo proposto por Chen et. al. o alcance atingido pelas forças que promovem a separação entre as fases azul e vermelha é função da densidade do fluido [Chen et al. 1991], ou seja diferentes tipos de interação só poderão ser simulados utilizando-se diferentes densidades.

Em ambos os casos isto pode ser problemático pois a distância de interação deve ser especificada em função do problema físico que se deseja simular e deve ser alterada quando se alteram os fatores de escala.

Outra análise interessante refere-se aos campos de velocidade nas interfaces, para tanto considere a figura 66, onde é apresentada uma interface esférica e os campos de velocidade a ela relacionados.

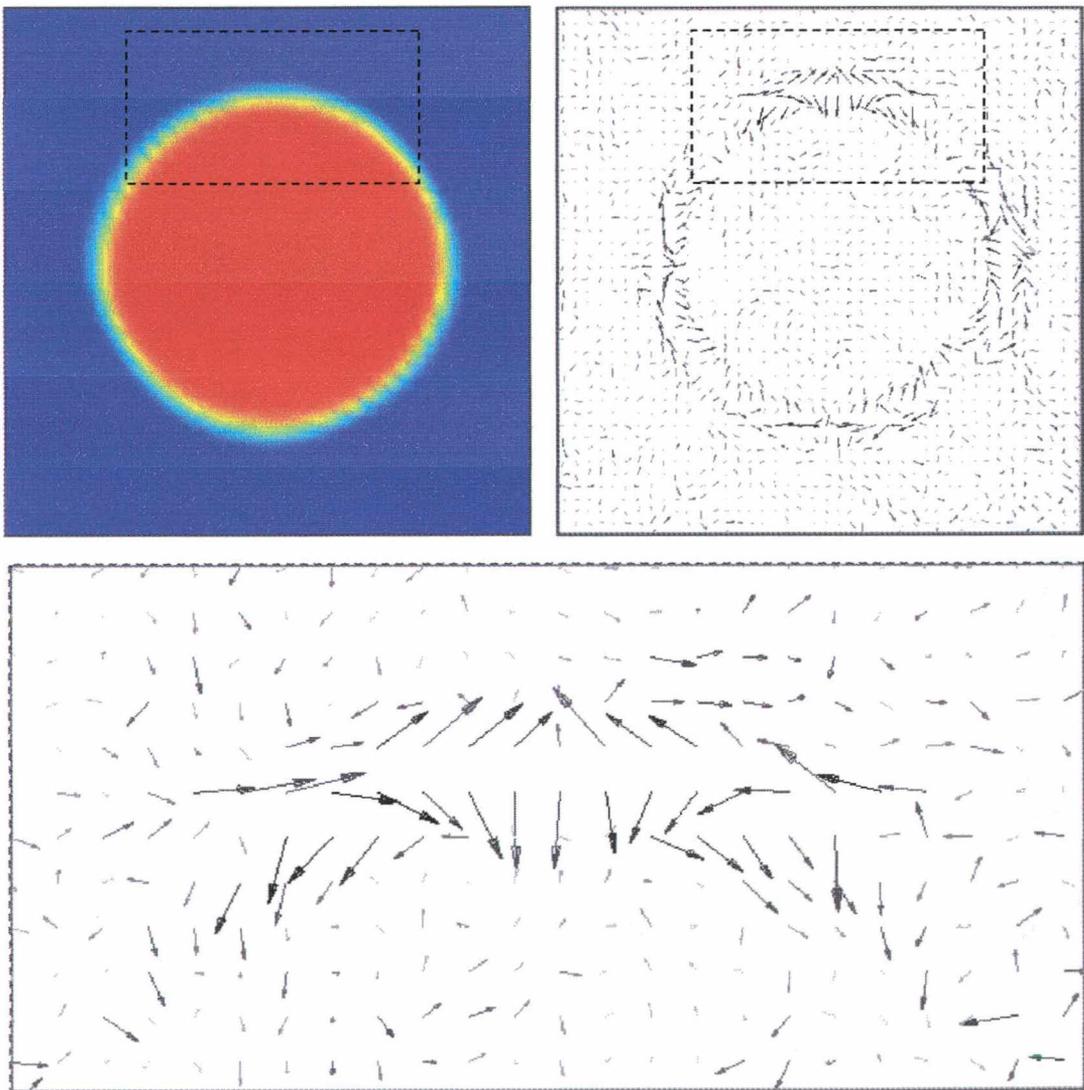


Figura 66 - Campo de velocidade na interface entre uma região azul e uma região vermelha

Na figura 66 é apresentado a simulação de uma bolha vermelha em região azul e destaca-se o campo de velocidades, o diâmetro da bolha é de aproximadamente 25 unidades de rede e a densidade dentro da bolha é em torno de 8 partículas por sítio. Nesta simulação utilizou-se uma rede de 80 por 80 sítios (na figura é apresentada apenas parte da rede), que foi inicializada com um região de fluido vermelho (na forma de um círculo) e uma região de fluido azul. Foram realizadas médias temporais sobre 1500 passos após o sistema ter evoluído durante 9000 passos (cerca de 60 minutos de simulação em PC Pentium 300 MHz). Nenhuma troca de variáveis, como proposto na seção 3.5, foi realizada tendo em vista a pequena magnitude das velocidades (a maior velocidade é aproximadamente 6×10^{-2} em unidades de rede). Este campo de velocidades indica a ação dos mediadores, nota-se que os vetores de dentro da bolha estão voltados para dentro e os vetores de fora voltados para fora, este efeito responsável pela separação entre as fases é também a causa da queda de densidade na interface. Nota-se também que o campo de velocidades é acentuado nas direções horizontal e vertical ao longo da interface da bolha ressaltando a simetria subjacente da rede utilizada (modelo FCHC projetado no plano), ou seja trata-se de um efeito devido à utilização de um espaço discreto. Verificou-se que este efeito é bastante reduzido quando se reduz a densidade dos fluidos, como pode ser visto na figura 67 (página seguinte). As dimensões utilizadas nesta simulação foram as mesmas das utilizadas na simulação anterior, a densidade média entretanto foi alterada para 5 partículas por sítio, a maior velocidade foi reduzida em cerca de 50% em relação à simulação anterior. Nota-se no campo de velocidades que os vetores apontam, em grande maioria, para o interior da bolha, isto leva à suposição de que a densidade aumentaria no interior da bolha. Este efeito realmente ocorre, conforme pode-se verificar a partir da figura 68, que apresenta em linha cheia a densidade (número médio de partículas vermelhas) correspondente à simulação da figura 67 (média entre 9000 e 10500 passos) e em linha tracejada a densidade após 30000 passos. Obviamente a densidade não pode aumentar indefinidamente, assim quando esta densidade fica

suficientemente alta ocorre uma inversão das velocidades que passam a apontar para fora da bolha, como é possível observar a partir do campo de velocidades da figura 69, que é uma seqüência, após 30000 passos, da simulação apresentada na figura 67. Portanto, nota-se um comportamento oscilatório, que quando a densidade é mais alta não foi possível observar.

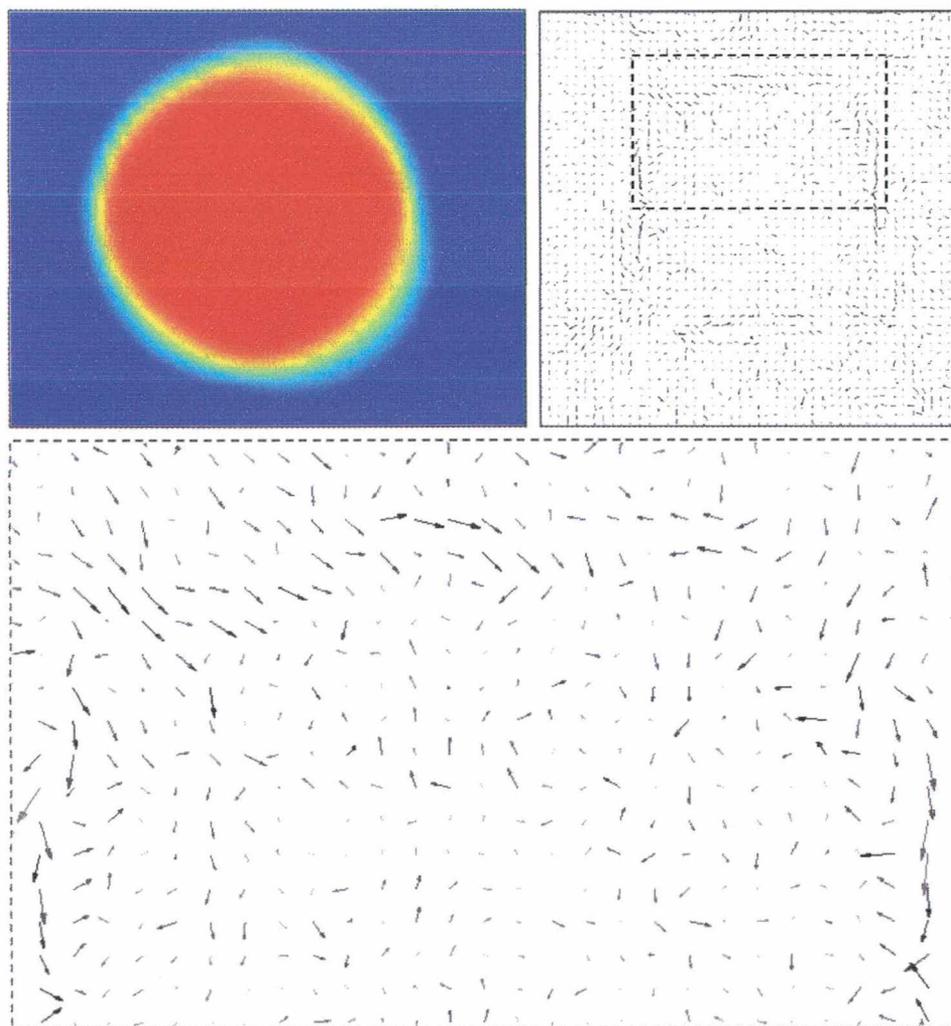


Figura 67. Campo de velocidades para uma bolha (densidade de aproximadamente 5 partículas por sítio)

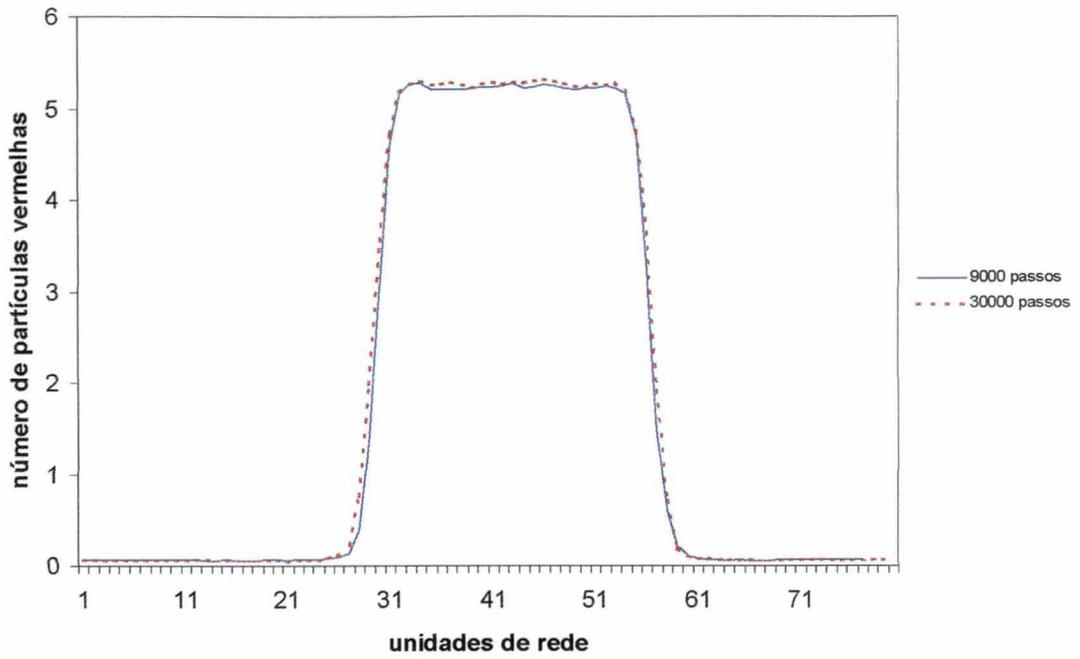


Figura 68 - Densidade média de partículas vermelhas

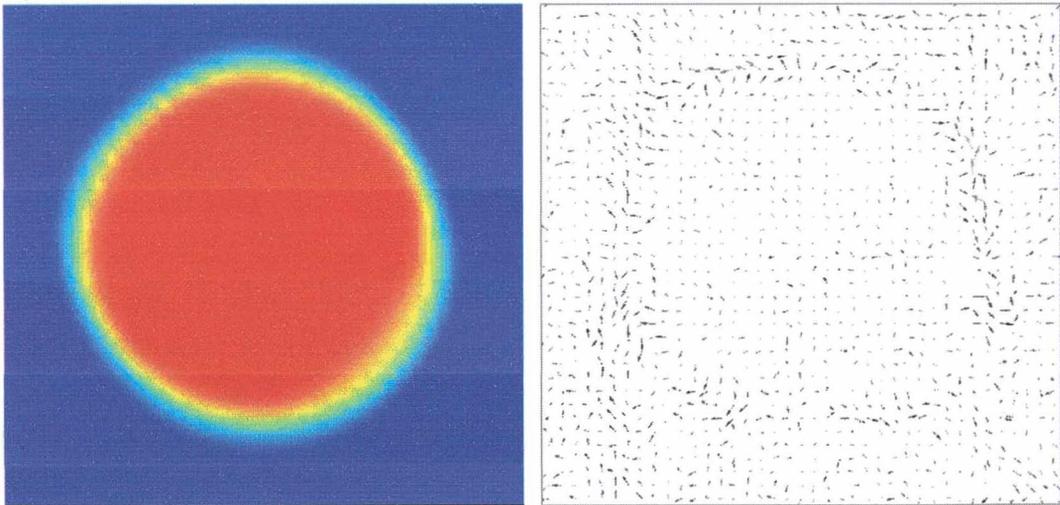


Figura 69 - Campo de velocidades na interface de uma bolha - densidade de 5 partículas por sítio

A formação de uma gota sob a ação da gravidade é um outro exemplo de um fenômeno complexo que pode ser simulado através do uso de modelos de gás em rede. Veja a figura 70.

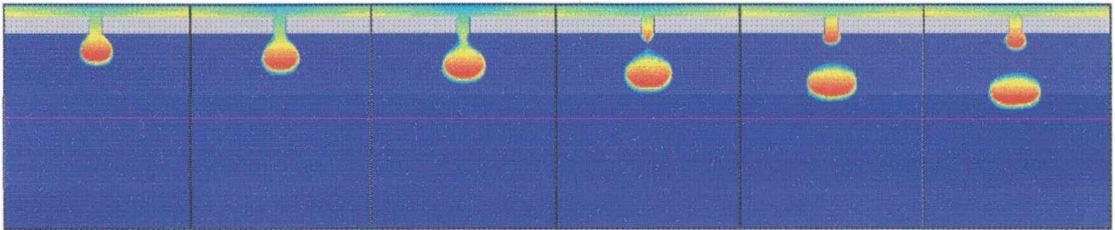


Figura 70 – Simulação da formação de uma gota

Nesta simulação foi utilizada uma rede de 200 por 300 sítios em uma simulação de cerca de 4 horas, foram realizadas médias temporais sobre 200 passos de tempo.

A simulação da formação de uma gota pode ser comparada com a fotografia do perfil de uma gota apresentada na figura 71 [Adamson 1990].

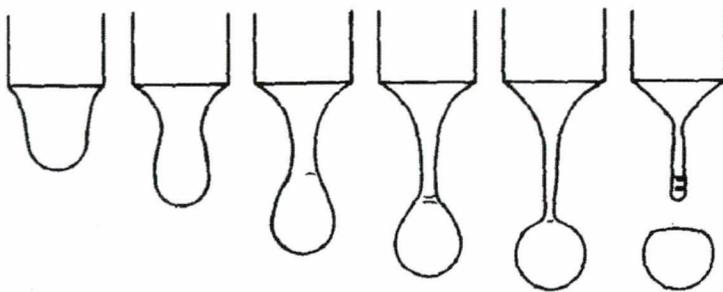


Figura 71 – Perfil de uma gota fotografada

Apesar da fotografia ser de uma gota de um líquido num gás e a simulação ser de fluidos de densidade e viscosidade próximas, a concordância obtida entre formas pode ser considerada excelente. Destaca-se especialmente o efeito dinâmico que faz com que haja um achatamento na

parte superior quando esta se desliga do restante do fluido e que a simulação reproduz adequadamente.

Alguns comentários finais sobre o trabalho são apresentados no capítulo seguinte.

CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES

Neste trabalho foram apresentados modelos de gás em rede para simulações de escoamentos monofásicos e simulações de fluidos imiscíveis. Foi apresentada a dinâmica destes modelos do ponto de vista microscópico e macroscópico e diversos resultados de simulações.

Destaca-se primeiramente a utilização dos modelos de gás em rede booleanos para a determinação de permeabilidade intrínseca de rochas, cujos resultados mostraram-se bastante satisfatórios. Devido às características dos modelos booleanos que implicam na necessidade de realização de médias espaciais e temporais, estes são especialmente adequados à determinação de características globais de escoamentos, daí sua utilização para determinação de permeabilidade.

Em aplicações onde se deseja os campos de velocidade ou pressão a aplicação do modelo de rede BGK mostrou-se mais adequada, especialmente, quando se deseja simular escoamentos sujeitos a efeitos inerciais, ou transitórios de escoamentos. Resultados de simulações envolvendo transitórios são apresentados, e é apresentado, também, uma comparação entre resultados obtidos com a utilização do modelo de rede BGK e resultados obtidos a partir da utilização do método de volumes finitos.

Apesar destes bons resultados obtidos com a utilização de modelos monofásicos, a principal realização do presente trabalho está na criação e utilização de um novo modelo de gás em rede para fluidos imiscíveis. Destaca-se a flexibilidade e simplicidade do modelo proposto frente aos outros modelos, isso fica bem claro quando se deseja simular fenômenos onde a distância de interação é importante, (como a coalescência), pois os modelos anteriormente propostos não permitem que se controle (independentemente da densidade) a distância de interação, dificultando este tipo de simulação.

O modelo de gás em rede com mediadores também permite que se controle as interações entre os fluidos e as regiões sólidas, ou seja, permite a simulação de fluidos molhantes e não-molhantes e com isso, é possível a simulação de fenômenos de invasão por capilaridade, como pôde ser visto no capítulo anterior.

Estas características do modelo, aliadas a outras características presentes em todos modelos de gás em rede, como a facilidade de lidar com geometrias complexas, tornam-no adequado para uma futura utilização para determinação de permeabilidade relativa. Além desta utilização de interesse tecnológico, pode-se pensar na utilização do modelo como uma espécie de laboratório, permitindo o estudo das características essenciais de fenômenos complexos como coalescência e separação de fases.

Para finalizar é importante ressaltar que, apesar dos bons resultados obtidos com a utilização do modelo proposto, muito há ainda a ser feito. Destacando-se, entre os futuros desafios, estudos de permeabilidade relativa e a adaptação do modelo para simulação de microemulsões e transições de fase.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Adamson, A. **Physical Chemistry of Surfaces – 5th ed.**. John Wiley & Sons, 1990.

Adler, C.; d’Humières, D.; Rothman, D. H. Surface tension and interface fluctuations in immiscible lattice gases. **J. Physique I France**, v.4, p. 29-46, 1994.

Alexander, F. J.; Chen, S.; Grunau, D. W. Hydrodynamic spinodal decomposition: Growth Kinetics and scaling functions. **Physical Review B**, v.48, p.634-637, 1993.

Aris, R. **Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics**. Prentice-Hall, 1962.

Batchelor, G. K. **An Introduction to Fluid Dynamics**. Cambridge University Press, 1967.

Boghosian B. M.; Taylor, W. Correlations and Renormalization in Lattice Gases. **Physical Review E**, v.52, p.510-544, 1995.

Boghosian B. M.; Yepez, J.; Alexander, F. J.; Margolus, N. H. Integer Lattice Gases. **Physical Review E**, v.55, p.4137-4147, 1997.

Broadwell, I. E. Shock structure in a simple discrete velocity gas. **Phys. Fluids**, v.7, p.1243, 1964.

Cercignani, C. **Mathematical methods in kinetic theory** – 2nd ed. Plenum Press, 1990.

Chapman, S.; Cowling, T. G. **The Mathematical Theory of Non-uniform Gases**. Cambridge University Press, 1952.

Chen, H.; Teixeira, C.; Molvig K. Digital Physics approach to computational fluid dynamics: some basic theoretical features. **Int. J. Mod. Phys. C**, v.8, n.4, p.675-684, 1997.

Chen, S.; Doolen, G. D.; Eggert, K. G.; Grunau, D.; Loh, E. Local lattice-gas model for immiscible fluids. **Phys. Rev. A**, v.43, p.7053-7056, 1991.

Chen, S.; Wang, Z.; Shan, X.; Doolen, G. D. Lattice Boltzmann Computational Fluid Dynamics in Three Dimensions. **J. Stat. Phys.**, v.68, p.379-400, 1992.

Chen, S.; Doolen, G. D.; Eggert, K. G. Lattice-Boltzmann Fluid Dynamics. **Los Alamos Science**, v.22, p.100-109, 1994.

Coxeter, H. S. M. **Regular Polytypes**. Dover, 1977.

d'Humières D.; Lallemand P.; Frisch, U. Lattice gas models for 3D hydrodynamics. **Europhys. Lett.**, v.2, p.291-297, 1986.

d'Humières D.; Lallemand P. Numerical Simulations of Hydrodynamics With Lattice Gas Automata in Two Dimensions. **Complex Systems**, v.1, p.599-632, 1987.

Elton, B. H.; Levermore, C. D.; Rodrigue, G. H. Convergence of convective-diffusive lattice Boltzmann methods **SIAM J. Numer. Anal.**, v.32, p.1327-1354, 1995.

Frisch, U.; Hasslacher B.; Pomeau Y. Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation **Physical Review Letters**, v.56, p.1505-1508, 1986.

Frisch, U.; d'Humières, D.; Hasslacher, B.; Lallemand, P.; Pomeau, Y.; Rivet, J. Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. **Complex Systems**, v.1, p.649-707, 1987.

Ghia, U.; Ghia, K.N.; Shin C. T. High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a multigrid Method. **Journal of Computational Physics**, v.48, p.387-411, 1982.

Grunau, D.; Chen S.; Eggert, K. A lattice- Boltzmann model for multiphase fluid flows. **Phys. Fluids A**, v.5, p.2557-2562, 1993.

Gunstensen, A. K.; Rothman, D. H.; Zaleski, S.; Zanetti, G. A lattice-Boltzmann model of immiscible fluids. **Phys. Rev. A**, v.43, p.4320-4327, 1991.

Hardy, J.; Pomeau, Y.; de Pazzis O. Time Evolution of a Two-Dimensional Model System. I. Invariant States and Time Correlation Functions. **J. Math. Phys.**, v.14, p.1746-1759, 1973.

Hardy, J.; de Pazzis O.; Pomeau Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation fuctions. **Phys. Rev. A**, v.13, p.1949-1961, 1976.

Hénon, M. (1) An H-theorem for lattice gases. Appendix F. in: Frisch, U.; d'Humières, D.; Hasslacher, B.; Lallemand, P.; Pomeau, Y.; Rivet, J. Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. **Complex Systems**, v.1, p.649-707, 1987.

Hénon, M. (2) Viscosity of a lattice gas **Complex Systems**, v.1, p.763-789, 1987.

Kadanoff, L. P.; McNamara, G. R.; Zanetti, G. A Poiseuille Viscometer for Lattice Gas Automata **Complex Systems**, v.1, p.791-803, 1987.

Landau, L. D.; Lifshitz, E. M. **Fluid Mechanics – 2nd ed.** Butterworth-Heinemann, 1987.

Liang, Z. R.; Fernandes, C. P.; Magnani, F.S.; Philippi, P. C. A Reconstruction Technique of 3-D Porous Media by using Image Analysis and Using Fourier Transform. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v.21, p.273-283, 1998.

McNamara G. G.; Zanetti G. Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata **Physical Review Letters**, v.61, p.2332-2335, 1988.

Orlandini, E.; Swift, M. R.; Yeomans, J. M. A lattice-Boltzmann model of binary-fluid mixtures **Europhys. Lett.**, v.32, p.463-468, 1995.

Philippi, P. C. **Modelos de gás em rede I.** Florianópolis, 1998. Notas de aula do curso oferecido pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica - Universidade de Santa Catarina.

Qian, Y. H.; d'Humières D.; Lallemand P. Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation **Europhys. Lett.**, v.17, p.479-484, 1992.

Rothman, D. H.; Keller J. Immiscible cellular-automaton fluids. **J. Stat. Phys.**, v.52, p.1119-1127, 1988.

Rothman, D. H.; Zaleski, S. **Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics**. Cambridge University Press, 1997.

Rem, P. C.; Somers, J. A. Cellular automata on a transputer network. In: **Discrete Kinetic Theory, Lattice-Gas Dynamics, and Foundations of Hydrodynamics**, Monaco R., ed. p.268-275, World Scientific, 1989.

Santos, L. O. E.; Philippi, P. C.; Damiani M. C. A Boolean Lattice Gas Method for Predicting Intrinsic Permeability of Porous Media. **Anais do Produccion 2000 / Aplicaciones de la ciencia en la ingeniería de petróleo**, 2000.

Shan, X.; Chen, H. Lattice-Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components **Phys. Rev. E**, v.47, p.1815-1819, 1994.

Penrose, O. **Foundations of statistical mechanics. A deductive treatment**. Pergamon Press, 1970.

van Genabeek, O.; Rothman D. H. Macroscopic manifestations of microscopic flows through porous media: Phenomenology from Simulation. **Annu. Rev. Earth Planet. Sci.**, v.24, p.63-87, 1996.

Wolfram, S. Statistical Mechanics of Cellular Automata. **Reviews of Modern Physics**, v.55, p.601-644, 1983.

Wolfram, S. Cellular automata as models of complexity. **Nature**, v.311, p.419, 1984.

Wolfram, S. Cellular Automaton Fluids: Basic Theory. **J. Stat. Phys.**, v.45, p.471-526, 1986.

Zou, Q.; He, X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. **Phys. Fluids**, v.9, n.6, p.1591-1598, 1997.

Apêndice A - Demonstração da isotropia do tensor $\sum_i \bar{c}_i \bar{c}_i \bar{c}_i \bar{c}_i$ para a rede FCHC

Seja $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta}$ um dos 81 componentes do tensor $\sum_i \bar{c}_i \bar{c}_i \bar{c}_i \bar{c}_i$, formado a partir dos vetores geradores da rede FCHC, ou seja, $\bar{c}_i = perm(\pm 1, \pm 1, 0, 0)$. Para facilitar os cálculos dos componentes, estes serão separados nas quatro classes a seguir:

| Classe | Característica dos membros | Membro típico |
|--------|-----------------------------|-------------------|
| I | Todos os índices iguais | $C_{xxxx}^{(4)}$ |
| II | Três índices iguais | $C_{xxx y}^{(4)}$ |
| III | Índices iguais aos pares | $C_{xxyy}^{(4)}$ |
| IV | Somente dois índices iguais | $C_{xxyz}^{(4)}$ |

Todos os membros que compõe uma classe são iguais, pois, como trata-se de um produto, a ordem dos índices não é importante. Portanto, o cálculo dos componentes se resume ao cálculo de membro típico de cada classe. Para a classe I tem-se:

$$C_{xxxx}^{(4)} = \sum_i c_{ix} c_{ix} c_{ix} c_{ix} = 6 + 6 = 12. \quad (\text{A.1})$$

Para a classe II:

$$C_{xxx y}^{(4)} = \sum_i c_{ix} c_{ix} c_{ix} c_{iy} = 1 - 1 + 1 - 1 = 0. \quad (\text{A.2})$$

Para a classe III:

$$C_{xxyy}^{(4)} = \sum_i c_{ix} c_{ix} c_{iy} c_{iy} = 1 + 1 + 1 + 1 = 4. \quad (\text{A.3})$$

E, finalmente, para a classe IV:

$$C_{xxyz}^{(4)} = \sum_i c_{ix} c_{ix} c_{iy} c_{iz} = 0. \quad (\text{A.4})$$

Lembrando que todo tensor isotrópico de quarta ordem pode ser escrito na forma,

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = \lambda\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \mu\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \eta\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \quad (\text{A.5})$$

é possível escrever as seguintes equações:

$$\lambda + \mu + \eta = 12, \quad (\text{A.6})$$

$$\lambda = 4, \mu = 4, \eta = 4. \quad (\text{A.7})$$

Logo o tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ pode ser escrito na forma dada por (A.5) e, conseqüentemente é um tensor isotrópico.

Apêndice B

A Boolean Lattice Gas Method for Predicting Intrinsic Permeability of Porous Media.

(artigo apresentado no congresso **Produccion 2000 - Aplicaciones de la ciencia en la ingeniería de petróleo** - Maio de 2000)

A Boolean Lattice Gas Method for Predicting Intrinsic Permeability of Porous Media.

L.O. E. Santos¹, P.C. Philippi^{2*}, M.C. Damiani³

(+) Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT).
Mechanical Engineering Department. Federal University of Santa Catarina
88040-900 Florianópolis, SC, Brazil.

(*) Engineering Simulation and Scientific Software (ESSS)
Parque Tecnológico de Florianópolis - Rodovia SC 401 km 001
88030-000 Florianópolis, SC, Brasil

Abstract

This paper presents a method for predicting intrinsic permeability of porous media based on Lattice Gas Cellular Automata (LGA) methods. LGA is a relatively recent method developed to perform hydrodynamic calculations. The method, in its simplest form, consists of a regular lattice populated with particles that hop from site to site in discrete time steps in a process, called *propagation*. After propagation, the particles in each site interact with each other in a process called *collision*, in which the number of particles and momentum are conserved. An exclusion principle is imposed in order to achieve better computational efficiency. In despite of its simplicity, this model evolves in agreement with Navier-Stokes equation for low Mach numbers. It is important to emphasize some aspects that make LGA methods very attractive for simulating flows through porous media. In fact, boundary conditions in flows through complex geometry structures are very easy to describe in LG simulation. Simulations are performed with integers needing less resident memory capability and boolean arithmetic reduces running time. The method is used to simulate flows through several Brazilian reservoir petroleum rocks leading to intrinsic permeability prediction. Simulation is compared with experimental results.

Keywords: *fluid flow, porous media, permeability, lattice-gas*

¹ Luis Orlando Emerich dos Santos has a BS degree in Electrical Engineering and a MSc degree in Physics. He is presently making his Doctoral studies in Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT) which include the use of lattice gas automata (LGA) for the analysis of single and two-phase flow displacements in 3D porous representations.

² Paulo C. Philippi is Professor at Federal University of Santa Catarina where he heads the Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT). He specializes in image analysis and processing, single and multiphase flow in porous media and lattice gas automata (LGA) methods.

* Corresponding Author (philippi@lmpt.ufsc.br)

³ Marcos Cabral Damiani is a software development engineer from the Engineering Simulation and Scientific Software (ESSS) staff. Presently, he is working in the software development of Imago at Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT).

1. Introduction

Lattice gas models (LGA) designate a large class of models whose main feature is the presence of a set of particles moving in a discrete space (a lattice). The use of such models to study and simulate fluid dynamics was firstly introduced by J. Hardy, O. de Pazzis e Y. Pomeau[1], in 1973, but it was only after 1986 that these models grow in increased importance due to the work of Frisch et al.[2],[3]. These authors formally demonstrated that the dynamics of such models under certain conditions was described by the Navier-Stokes equations for incompressible flows, and could be used to simulate such flows. Since then, several improvements have been made to simulate multifase flows[4],[5], phase transitions[6], and the development of a new method to simulate fluid dynamics: the Lattice-Boltzmann Method[7],[8].

This work is devoted to present the one-phase lattice gas model, which is applied to estimate the intrinsic permeability of sandstones. The microscopic and macroscopic dynamics are discussed and an order of magnitude analysis is presented to determine the range of applicability of LGA models. Several simulation results are also presented and compared with experimental data.

2. Model

Microscopic Dynamics

Lattice gas models are, basically, composed by particles distributed over a discrete space, the nodes of a regular lattice (Bravais lattice). The particles hop from a site to the neighbor sites in one time step with a discrete and limited velocities set.

Although simulation results presented in this paper are based on the three-dimensional FCHC model[9], the FHP lattice gas model (see fig.1) will be used to exemplify the dynamics and to help understanding the main features of LGA models. This model is based on a hexagonal lattice and is used to simulate 2D flows. Each site in the FHP model has 6 neighbors and it can be populated with 6 moving particles at most, each one with the respective velocity vector \mathbf{c}_i , pointing to one neighbor. In addition, a finite number of particles is allowed to be at rest, in each site. Although increasing computational difficulties in the construction of numerical algorithms and resident memory requirements, rest particles are important in LGA models to enlarge the number of possible microscopic states, at each site, and to prevent spurious collision invariants. In present work, one particle is allowed to be at rest, in each site.

In FHP model, the state of a site X at time T is represented by a set of 7 boolean variables, designating the presence ($n_i=1$) or absence ($n_i=0$) of a particle in a given direction i , n_0 indicates the presence or absence of a rest particle. For each time step, the dynamic evolution of the model is given in two steps. In the first step, designated as *collision step* (fig. 2), the state of site X is changed following collision rules conceived so as to preserve total mass and momentum of the site. In the second step, called *propagation step* (fig.3), particles are propagated to the neighbor sites, in accordance with their direction at site X after collision step. This is described by the evolution equation:

$$n_i(\mathbf{X}+\mathbf{c}_i, T+1)=n_i(\mathbf{X},T) + \omega_i(n_1,\dots,n_b) \quad (1)$$

where $\omega_i: (n_1,\dots,n_b) \rightarrow \{-1,0,1\}$ represents the collision operator which can take the values -1 , 1 or 0 , depending on the state (n_1,\dots,n_b) of site X before the collision. Considering S to be the set of 2^b

possible states, $s=(s_1, \dots, s_b)$ of site X and α : $SXS \rightarrow \{0,1\}$, to be the transition matrix (with $2^b X 2^b$ elements), the collision operator can be written as

$$\omega_i(n_1, \dots, n_b) = \sum_s \left[\sum_{s'} \alpha(s, s') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b \delta(n_{j+i}, s_{j+i}) \right] \quad (2)$$

where s' designates post collision states. In present work, it was considered changes to each possible state s' with the same probability with the inclusion of s between the post collision states.

The FCHC model

Three-dimensional regular lattices do not have the required symmetries and fail in describing fluid flow with isotropic properties. To overcome this problem d'Humières, Lallemand and Frisch[9] proposed the use of the face centered hipercube lattice (FCHC). This lattice is constructed using the vectors:

$$\mathbf{c}_i = \text{perm}(\pm 1, \pm 1, 0, 0) \quad (3)$$

where the symbol " $\text{perm}(a,b,c,d)$ " indicates all the permutations among a,b,c,d . There are six possible permutations and four combination of signs and, consequently, 24 vectors \mathbf{c}_i . Considering the three dimensional projection of FCHC lattice (i. e. the first three dimensions), two kinds of vectors are possible. Twelve vectors have the form

$$\mathbf{c}_i = \text{perm}(\pm 1, \pm 1, 0) \quad (4)$$

whose moduli are $\sqrt{2}$. These vectors will connect second neighbors in the three dimensional projection.

The remaining twelve vectors have the form

$$\mathbf{c}_i = \text{perm}(\pm 1, 0, 0) \quad (5)$$

correspond to vectors linking the first neighbors in the projection. It is important to notice that each projected vector of this form is the result of the projection of one of the two possible vectors in the four dimensional lattice:

$$\mathbf{c}_i = (\text{perm}(\pm 1, 0, 0), 1) \quad (6)$$

and

$$\mathbf{c}_i = (\text{perm}(\pm 1, 0, 0), -1) \quad (7)$$

therefore it is necessary to use two vectors linking the first neighbors in 3D projection, i. e., two particles are allowed to populate each of these directions.

In figure 4 is showed the projection of a 3D face centered cubic lattice in a square lattice.

Forcing the Flow

External body forces $\mathbf{g}(\mathbf{X})$ may be simulated in LGA by adding a fixed amount of momentum at site \mathbf{X} at each unitary time step. In present paper, this is performed after each collision step, by changing n_i by

$$\Delta n_i^g = P(\mathbf{X}) \left\{ \mathbf{g}_i \left[n_i (1 - n_{i+b/2}) - n_{i+b/2} (1 - n_i) \right] + \mathbf{g}_{i+b/2} \left[n_{i+b/2} (1 - n_i) - n_i (1 - n_{i+b/2}) \right] \right\} \quad (8)$$

whenever possible, i.e., whenever exclusion principle is not violated and mass is preserved, $P(\mathbf{X})$ being 1 when a random variable attributed to \mathbf{X} is smaller than $S(\mathbf{X})$ and 0 otherwise, in

accordance with a given probability $S(X)$, related to the external force strength. Eq. (1) is thus, modified, to give:

$$n_i(\mathbf{X}+\mathbf{c}_i, T+1) = n_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i(n_1, \dots, n_b) + \Delta n_i^g \quad (9)$$

Boltzmann Approximation

Lattice gas simulation starting from a given initial condition may be considered as a single realization of a stochastic process. Considering an *ensemble* of different realizations and calling

$$N_i = \langle n_i(\mathbf{X}, T) \rangle \quad (10)$$

corresponding to the expected value of the boolean variable n_i at a given point X and time T , the evolution equation satisfied by N_i can be found, at a closed form, by supposing that boolean variables n_i at X, T are non-correlated before collision. This is called *molecular chaos* hypothesis and gives

$$N_i(\mathbf{X}+\mathbf{c}_i, T+1) - N_i(\mathbf{X}, T) = \Omega_i = \sum_s \left[\sum_{s'} A(s, s') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b \delta(N_{j+i}, s_{j+i}) \right] \quad (11)$$

which is the dynamical evolution equation for the distribution N_i , in the Boltzmann approximation.

In the above equation,

$$\Omega_i = \langle \omega_i(n_1, \dots, n_b) \rangle \quad (12)$$

$$A(s, s') = \langle \alpha(s, s') \rangle \quad (13)$$

Using the semi-detailed balance condition, it may be proved that,

$$\sum_s A(s, s') = 1 \quad \forall s' \quad (14)$$

Equation (11) has an H-Theorem and an equilibrium solution, which is a Fermi-Dirac distribution function

$$N_i^o = \frac{1}{1 + \exp(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)} \quad (15)$$

Due to the discrete nature of the model, a linear low velocity approximation of Eq.(15) is used, written in terms of the density

$$\rho = \sum_{i=1}^b N_i + N_o b_r, \quad (16)$$

where b_r is the maximum number of rest particles allowed at each site X , and in terms of the mean velocity

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^b N_i \mathbf{c}_i. \quad (17)$$

This equilibrium solution can be written as

$$N_i^o = f \left[1 + \frac{Db}{c^2 b_m} c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{D^2 b^2}{2c^4 b_m^2} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \left(c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{c^2}{D} (1-b_r) \delta_{\alpha\beta} \right) u_\alpha u_\beta \right] + O(u^3) \quad (18)$$

for moving particles whereas for rest particles,

$$N_o^o = f \left[1 - \frac{D}{2c^2} \frac{b}{b_m} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) u^2 \right] + O(u^4) \quad (19)$$

In the above equations D is the Euclidean dimension of the lattice, $D=2$ in FHP and $D=4$ in FCHC models, $b = b_m + b_r$ and $f = \rho/b$.

Scaling to physical variables

Using h and ε as, respectively, a spatial and a time scale

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= h\mathbf{X} \\ t &= \delta T \end{aligned} \quad (20)$$

\mathbf{x} and t may be considered as physical variables, varying continuously in the spatial and time domain of the physical system to be described, when h and δ are small.

Lattice Gas Hydrodynamic Equations

Use of Chapman-Enskog method on the N_i evolution equation, Eq.(6), leads to lattice gas hydrodynamic equations, in the limit of low Knudsen number $Kn = h/L = \delta/\Gamma \ll 1$, where L is a characteristic length and Γ is a characteristic time:

$$\partial_t(\rho) + \partial_\beta(\rho u_\beta) = 0 \quad (21)$$

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta [g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha(p(\rho, u^2)) + \nu \partial_\beta [\partial_\beta(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha(\rho u_\beta)] + \eta \partial_\alpha [\partial_\beta(\rho u_\beta)] \quad (22)$$

where

$$g(\rho) = \frac{2}{3} \left(\frac{1 - \rho/12}{1 - \rho/24} \right) \quad (23)$$

$$p(\rho, u^2) = c_s^2 \rho - \frac{5}{4} M^2 \rho g(\rho) \quad (24)$$

and $c_s^2 = \frac{1}{2}$ is the square of LGA sound speed. The first and the second viscosity coefficients, respectively ν and η , are related to the eigenvalues of collision operator Ω . Equations (21)-(22) differ from Navier-Stokes hydrodynamic equations: i) by the inclusion of a $g(\rho)$ dependence in the inertial term, breaking Galilean invariance, ii) taking M as the Mach number, $M = U/c_s$, by a $O(M^2)$ additional term in the pressure equation (Eq.(24)) and iii) by the inclusion of density ρ inside the spatial derivatives in the viscous terms. These *non-physical lattice effects* disappear in the low Reynolds, $Re = U L/\nu$ and Mach numbers, $M = U/c_s$, limits. This was demonstrated by Rothman and Zaleski[10] by using *perturbation analysis*. In the following, a short *order of magnitude analysis* of LGA equations is presented, which corroborates Rothman and Zaleski results.

In fact, Eqs (17)-(18) can be written as

$$\partial_t(\rho) + \rho \partial_\beta(u_\beta) + u_\beta \partial_\beta(\rho) = 0 \quad (25)$$

$$\begin{aligned}
\rho \partial_t(u_\alpha) + u_\alpha \partial_t(\rho) + \rho g(\rho) \partial_\beta(u_\alpha u_\beta) + u_\alpha u_\beta \partial_\beta[\rho g(\rho)] = -\partial_\alpha(p) \\
+ \nu \partial_\beta(\rho) (\partial_\beta(u_\alpha) + \partial_\alpha(u_\beta)) \\
+ \rho \nu \partial_\beta [(\partial_\beta(u_\alpha) + \partial_\alpha(u_\beta))] \\
+ \nu \partial_\beta [(u_\alpha \partial_\beta(\rho) + u_\beta \partial_\alpha(\rho))] \\
+ \rho \eta \partial_\alpha [\partial_\beta(u_\beta)] + \eta u_\beta \partial_\alpha [\partial_\beta(\rho)]
\end{aligned} \quad (26)$$

In the low Mach number limit, viscous effects have the same order of magnitude as the driven force

$$O(\partial_\alpha(p)) = O(\rho \nu \partial_\beta [\partial_\beta(u_\alpha) + \partial_\alpha(u_\beta)]) = \frac{\rho_0 U \nu}{L^2} \quad (27)$$

and, in accordance with the state equation, Eq. (24), density fluctuations are related to pressure perturbations by

$$\Delta \rho / \rho_0 \sim \frac{\Delta p}{c_s^2 \rho_0} \sim \frac{M^2}{Re} \quad (28)$$

For viscous flows the correct time scale to be used is $T_v = L^2/\nu$, which is the time scale for the viscous propagation of velocity fluctuations. In this case, in the mass conservation equation, Eq. (21),

$$O(\partial_t(\rho)) = \frac{\Delta \rho U}{L} \sim \frac{\rho_0 c_s}{L} \frac{M^3}{Re} \quad (29)$$

$$O(\rho \partial_\beta(u_\beta)) = \frac{\rho_0 U}{L} = \frac{\rho_0 c_s}{L} M \quad (30)$$

$$O(u_\beta \partial_\beta(\rho)) = \frac{U \Delta \rho}{L} \sim \frac{c_s \rho_0}{L} \frac{M^3}{Re} \quad (31)$$

and the incompressibility condition

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (32)$$

is recovered in the limit $M^2 \ll Re$.

A similar analysis carried on the momentum equation, shows that all the terms are of $O\left(\frac{\rho_0 U^2 M^2}{L Re}\right)$ excepting the following ones:

$$\rho g(\rho) \partial_\beta(u_\alpha u_\beta) \sim \frac{\rho_0 U^2}{L} \quad (33)$$

$$\rho \partial_t(u_\alpha) \sim \frac{\rho_0 U^2}{L} \frac{1}{Re} \quad (34)$$

$$u_\alpha \partial_t(\rho) \sim \frac{\rho_0 U^2}{L} \left(\frac{M}{Re}\right)^2 \quad (35)$$

$$\rho \nu \partial_\beta [(\partial_\beta(u_\alpha) + \partial_\alpha(u_\beta))] \sim \frac{\rho_0 U}{L} \frac{1}{Re} \quad (36)$$

and the correct hydrodynamic equations are found when $M \ll Re \ll 1$:

$$\rho \partial_t(u_\alpha) = \partial_\alpha(p) + \rho \nu \partial_\beta \partial_\beta u_\alpha \quad (37)$$

which is the momentum equation for low Reynolds number incompressible flows. It must be observed that, as $M < 1$, the above condition is more restrictive than $M^2 \ll Re \ll 1$.

Boundary conditions

Collision step uses local information only and therefore, boundary conditions are introduced, solely, in the propagation step. In the sites near the wall, all particles that would hit the walls have their velocity reversed, during this step: $c_i \rightarrow -c_i$. This is called a *bouncing-back* boundary condition. Bouncing-back restriction leads to non-slip boundary condition at the wall.

In the inlet and outlet regions periodic boundary conditions are used: every particle exiting the simulation region from one edge is injected into the other edge with the same velocity. In the simulations of flows through porous media non-solid regions were added in the inlet and the outlet boundaries in order to guarantee that a particle exiting the lattice will never encounters a wall in the other edge. These non-solid region were also used to force the flow in the interested region, acting as hydraulic pumps to compensate head loss produced by porous structure

3. Validation: Poiseuille flow

Navier-Stokes equations predict a parabolic velocity profile for the flow between two parallel plates. Figure 5 shows simulation results compared with theoretical one. Simulation was performed using FCHC model, in a three-dimensional channel, with 39 lattice-units in thickness and periodic conditions were imposed in the outer plane. As can be seen, a good agreement between the simulated and the theoretical results was obtained.

4. Results

Several simulations were performed to calculate intrinsic permeability of Brazilian sandstones. Simulations start from three-dimensional representations of the porous structure, reconstructed from petrographic thin plates by using Liang *et al.* method[11],[12]. Details about reconstruction method can be found in a companion paper submitted to present meeting[12]. Segmentation methods provide binary two-dimensional images, from digital color and/or gray-level images. Three-dimensional reconstruction is based on the generation of three-dimensional stochastic realizations, preserving the statistical moments of phase function, which are measured on the target binary image. Present reconstruction method preserves the two first moments of the phase function: porosity and auto-correlation. A main reconstruction parameter is the sampling factor 'n'. Sampling factor $n=1$ means that three-dimensional representation and the binary image have the same spatial resolution. As sampling factor n increases, resolution decays with the same ratio. In general, it is very difficult to preserve original resolution, in reconstructed representations, due to limitations inherent to the reconstruction method itself, which fails in preserving the fine details of the porous structure. In this sense, the best reconstructed microstructure is considered to be the one generated with the sampling factor that gave the best agreement between pore size distributions, measured on the original binary image and on cross-sections of the three-dimensional representation. Further details can be found in references [11]-[13]. Figure 6 gives a comparison for pore size distribution between reconstructed three-dimensional representations and original binary image for brazilian sandstone P26.2K69.7 (source data from CENPES/Petrobras). Best sampling factor is $n=2$. The volume amount of small features is overestimated in reconstructed representations with $n=1$, whereas this amount is underestimated for $n=3$.

Table I gives some simulation results and comparison with experimental data for Brazilian sandstones. Best sampling factor is indicated by an (*). Another important reconstruction parameter is the 3D representation linear size N . Size N must be great enough to

assure statistical homogeneity, with respect to fluid flow problem. Nevertheless, computer resident memory requirements are multiplied by 8, when N doubles. In this way, considering computer limitations, simulation starts from small and proceeds to larger linear sizes until convergence.

A typical simulation in a structure of 100^3 voxels uses approximately three hours, using a Pentium II - 300MHz microcomputer and ten hours to simulate in a structure of 200^3

5. Conclusions

A lattice gas model was presented as a tool for performing fluid dynamic simulations in complex geometry, especially in porous media. The macroscopic behavior of the model was discussed in order to find its range of applicability. Finally, simulation results were presented, in the calculation of the intrinsic permeability of Brazilian sandstones.

Results appear to confirm the suitability of LGA based methods in the calculation of intrinsic permeability.

Acknowledgements

The authors would like to acknowledge CENPES/PETROBRAS (Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo A. Miguez de Mello) for providing the images and experimental data for Berea and Brazilian sandstones and the financial support of CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), PADCT (Programa de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico), RHAÉ (Programa de Formação de Recursos Humanos em Áreas Estratégicas) and FINEP (Financiadora de Estudos e projetos).

7. References

- [1] – Hardy, J., Pomeau, Y., de Pazzis O. (1973). “Time Evolution of a Two-Dimensional Model System. I. Invariant States and Time Correlation Functions” *J. Math. Phys.* **14**, 1746-1759.
- [2] – Frisch, U., Hasslacher B., Pomeau Y. (1986). “Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation” *Physical Review Letters* **56**, 1505-1508.
- [3] – Frisch, U., d’Humières, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau, Y. and Rivet, J. (1987). “Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions” *Complex Systems* **1**, 649-707.
- [4] – Rothmann, D. H., Keller, J. M. (1988). “Immiscible Cellular-Automaton Fluids” *J. Stat. Phys.* **52**, 1119-1127.
- [5] – Chen, S., Doolen G. D., Eggert, K., Grunau, D. and Loh, E. Y. (1991). “Local lattice-gas model for immiscible fluids” *Physical Review A* **43**, 7053-7056.
- [6] – Appert, C. and Zaleski (1990). “A lattice gas liquid-gas transition” *Physical Review Letters* **64**, 1-4.
- [7] - McNamara G. G. and Zanetti G. (1988). “Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata” *Physical Review Letters* **61**, 2332-2335.
- [8] – Higerá, F. and Jimenez, J. (1989). “Boltzmann approach to lattice gas simulations.” *Europhys. Lett.* **9**, 663-668.
- [9] – d’Humières, D., Lallemand, P., and Frisch, U. (1986). “Lattice gas models for 3D hydrodynamics” *Europhys. Lett.* **2**, 291-297.
- [10] – Rothman, D. H., Zaleski, S. (1997). *Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics* (Cambridge University Press).
- [11] – Liang, Z. R.. (1997) “Computer Generation and Application of 3-D Reconstructed Porous Structures: From 2-D Images to the Prediction of Permeability” Doctoral Thesis Depto de Eng. Mecânica, UFSC.
- [12] – Liang, Z. R., Fernandes, C. P., Magnani, F.S. and Philippi, P. C., (1998) “A Reconstruction Technique of 3-D Porous Media by using Image Analysis and Using Fourier Transform”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **21**, 3-4, 273-283.
- [13] – M. C. Damiani, C. P. Fernandes, A. D. Bueno, L. O. E. Santos, J. A. B. da Cunha Neto, P. C. Philippi “Predicting Physical Properties of Reservoir Rocks from the Microstructural Analysis of Petrographic Thin Sections”. Submitted to Produccion 2000 / Aplicaciones de la ciencia en la ingeniería de petróleo, **May 08-12 /2000, Foz de Iguacu**

Figures and Tables

| Sandstone Sample | Experimental Permeability | Reconstructed Image Linear Size (N) | Sampling Factor (n) | Simulated Permeability |
|------------------|---------------------------|-------------------------------------|---------------------|------------------------|
| 67409 | 441 | 100 | 6 | 469 |
| 67409 | 441 | 100 | 5 (*) | 368 |
| 67409 | 441 | 200 | 5 (*) | 462 |
| 59853 | 145 | 150 | 3 | 218 |
| 59853 | 145 | 100 | 4 (*) | 238 |
| 59853 | 145 | 150 | 4 (*) | 256 |
| P26.2K69.7 | 69.7 | 150 | 2 (*) | 90 |
| P26.2K69.7 | 69.7 | 200 | 2 (*) | 77 |
| 51446 | 154 | 100 | 4 | 55 |
| 51446 | 154 | 100 | 5 | 64 |
| 51446 | 154 | 100 | 6 (*) | 81 |
| 51440 | 316 | 100 | 4 | 261 |
| 51440 | 316 | 100 | 5 | 238 |
| 51440 | 316 | 100 | 6 (*) | 316 |

(*) Best sampling factor

Table I - Simulation results and comparison with experimental data (Experimental data and source digital images where furnished by CENPES/ Petrobras)

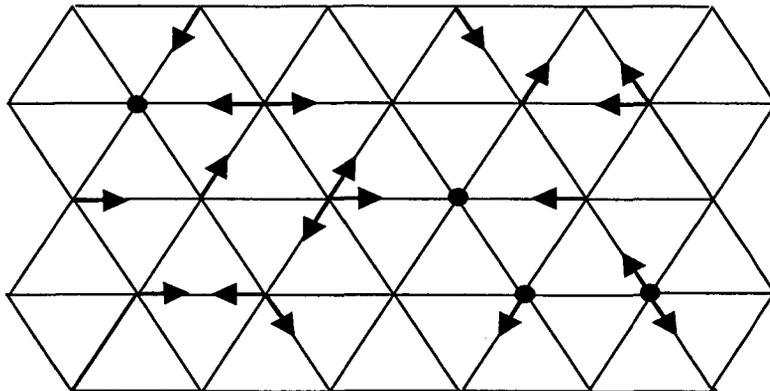


Figure 1: FHP model. The arrows represent the moving particles and the circles represent the rest particles.

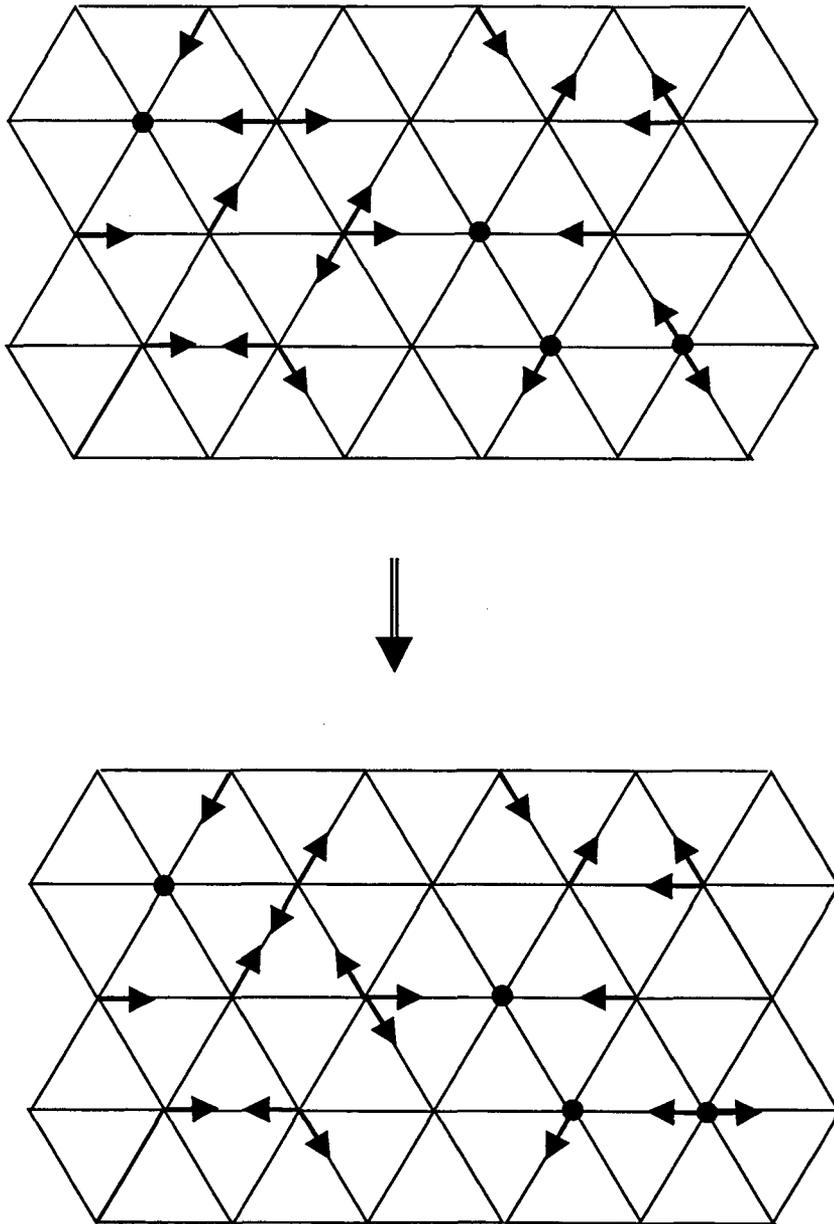


Figure 2: Effect of collisions for a given configuration of the FHP model

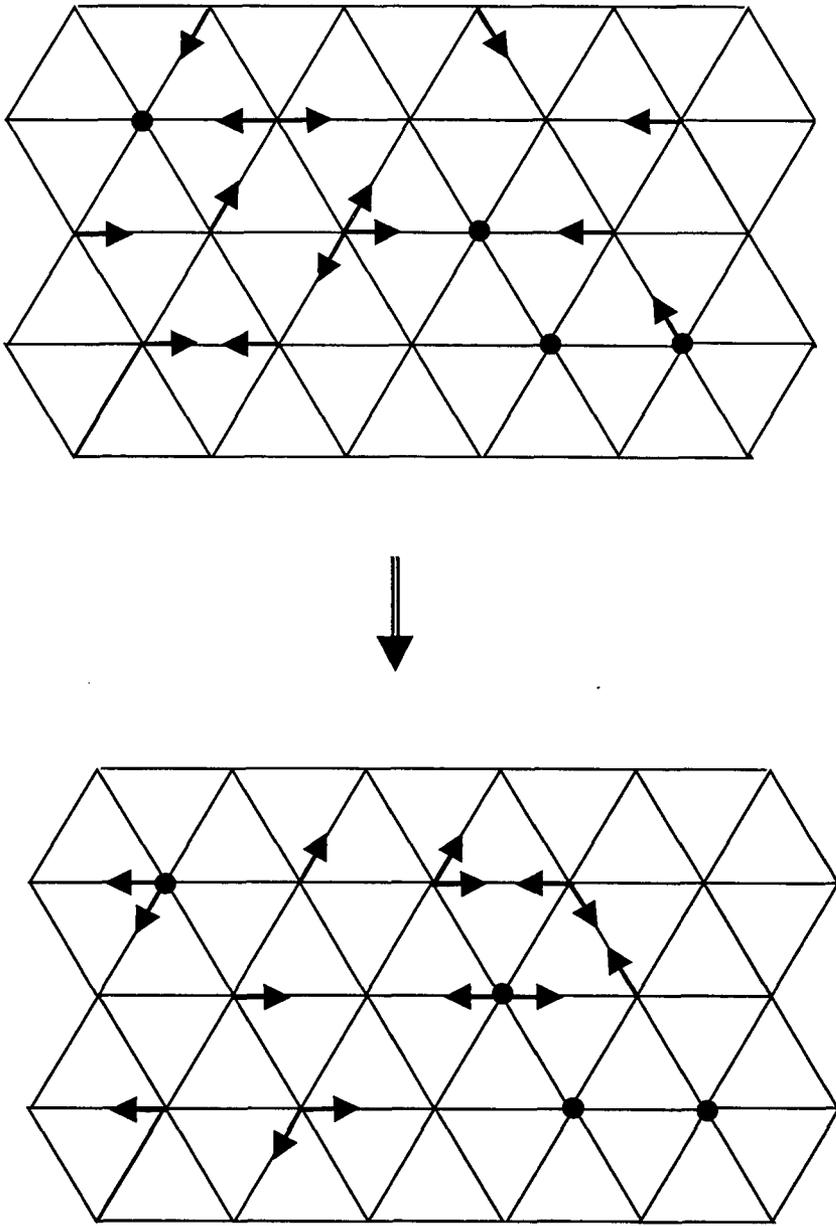


Figure 3: Effect of propagation for a given configuration of the FHP model

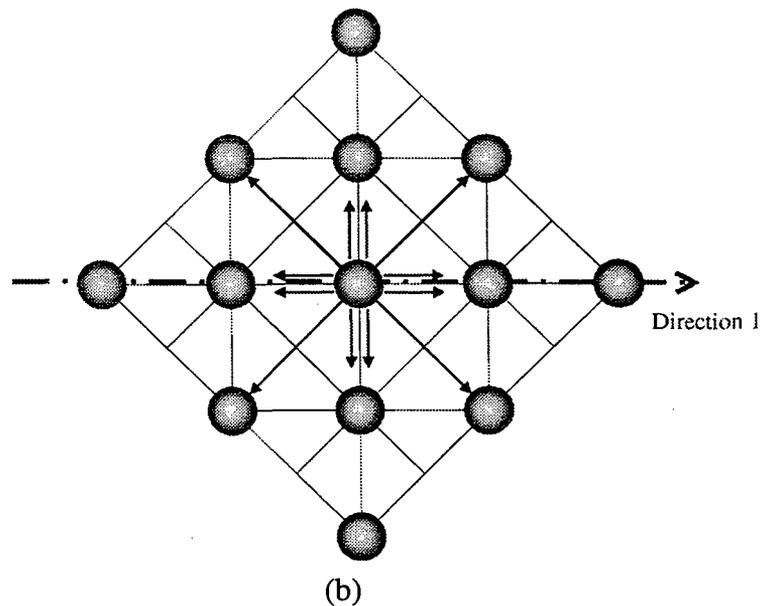
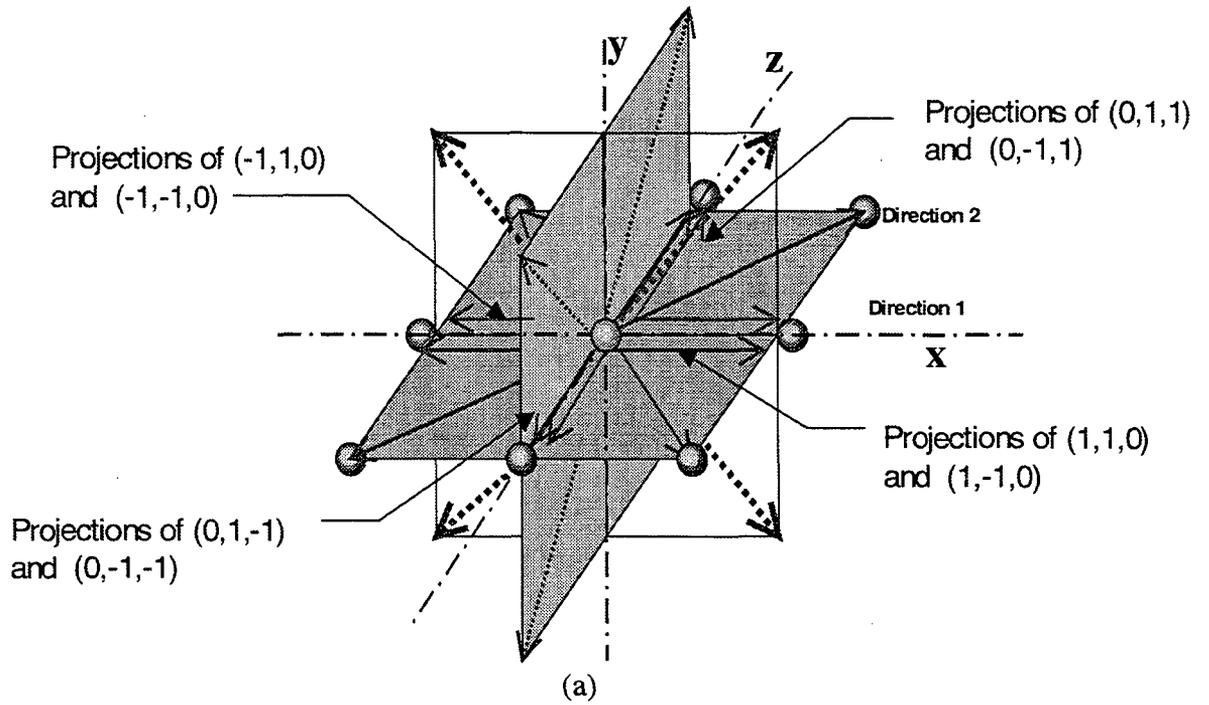


Figure 4. (a) Projection of a three-dimensional lattice whose elemental vectors are given by perm $(\pm 1, \pm 1, 0)$ on the plane xz . Microscopic states are given by $(s_{11}, s_{12}, s_2, s_{31}, s_{32}, s_4, s_{51}, s_{52}, s_6, s_{71}, s_{72}, s_8)$. When s_{11} and s_{12} are both equal to 1, before the propagation step, *two particles* are to be propagated from site X to its neighbor site in direction 1, resulting from the projections of directions $(1, 1, 0)$ and $(1, -1, 0)$. Vectors c_i have all the same norm $\sqrt{2}$, when lattice unit is considered to be unitary. In this way, each site has 8 neighbors in the plane xz , composing a regular plane lattice where the state of each site is represented by a vector with 12 Boolean variables representing moving

particles.(b) Plane xz , showing the main axes neighbors to site X . Each of these sites can exchange two particles with central site.

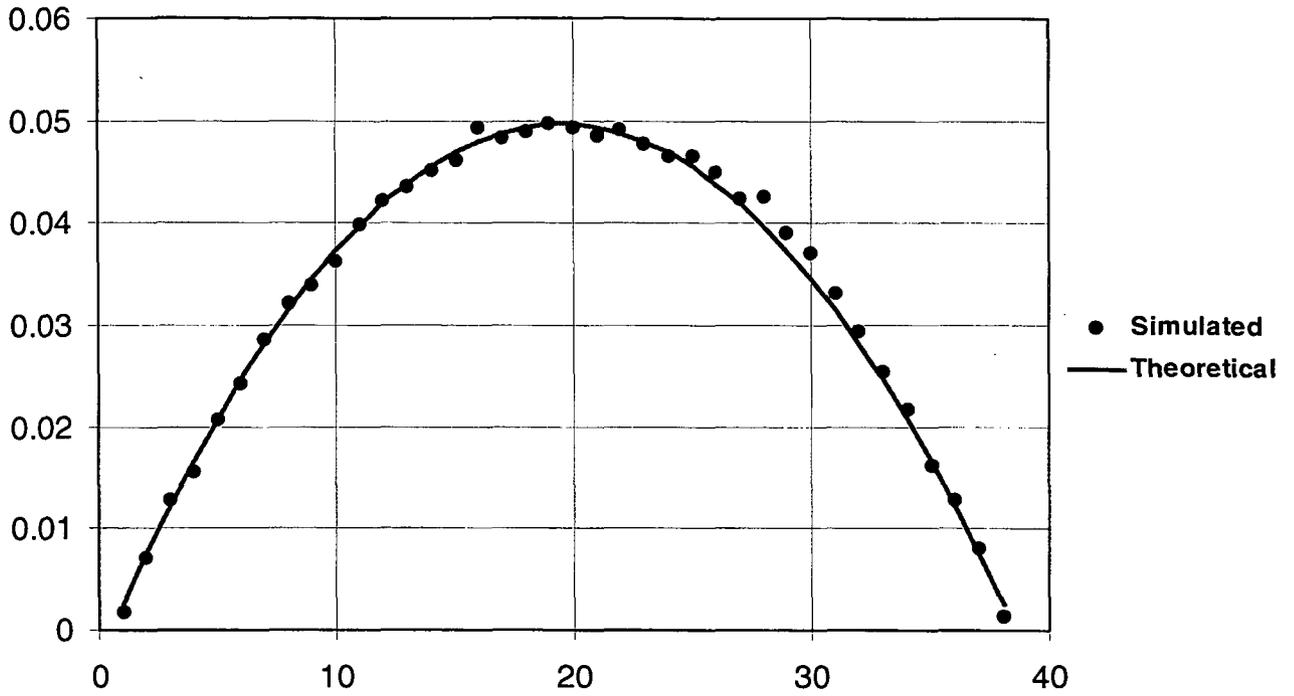


Figure 5. Velocity profile of a flow between two parallel plates. Simulation was performed using a lattice of 40 sites in the direction perpendicular to flow plane. Periodic conditions were used.

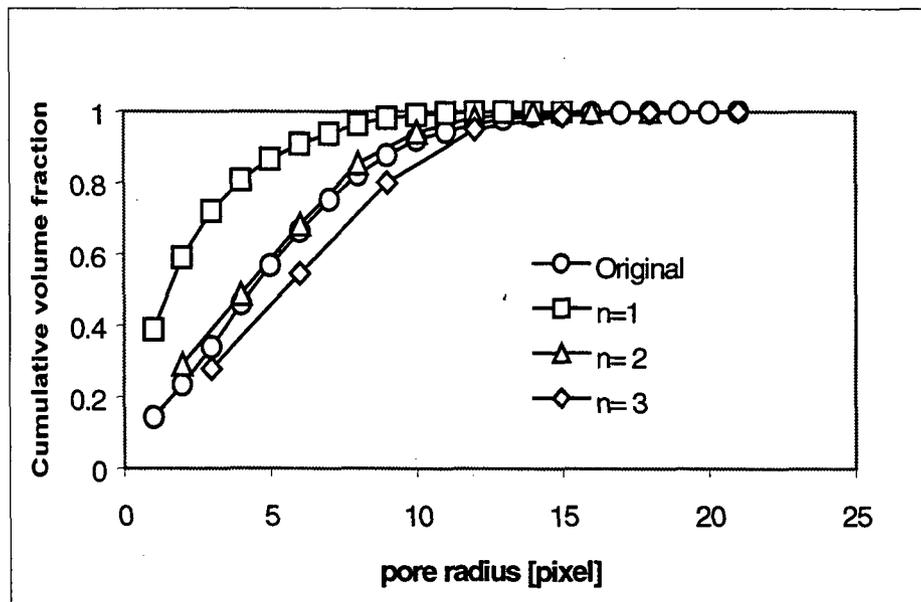


Figure 6 Comparison for pore size distribution between reconstructed three-dimensional representations and original binary image for brazilian sandstone P26.2K69.7 (Digital images where

Apêndice C

SIMULATION OF FLUID FLOW INSIDE POROUS STRUCTURES USING LATTICE BOLTZMANN MODEL

(artigo apresentado no congresso **Produccion 2000 - Aplicaciones de la ciencia en la
ingeniería de petróleo** - Maio de 2000)

SIMULATION OF FLUID FLOW INSIDE POROUS STRUCTURES USING LATTICE BOLTZMANN MODEL

L.O. E. Santos¹, P.C. Philippi^{2*} M.C. Damiani³

(+) Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT)
Mechanical Engineering Department. Federal University of Santa Catarina
88040-900 Florianópolis, SC, Brazil.

(*) Engineering Simulation and Scientific Software (ESSS)
Parque Tecnológico de Florianópolis - Rodovia SC 401 km 001
88030-000 - Florianópolis - SC - Brazil

Abstract

LB methods were recently developed for the numerical integration of the Navier-Stokes equation based on discrete Boltzmann transport equation. Derived from the lattice gas method, LB is a powerful alternative to the standard methods in computational fluid dynamics. In recent years, it has received much attention and has been used in several applications like simulations of flows through porous media, turbulent flows and multiphase flows. Present paper presents the results of using Lattice-Boltzmann methods (LB) for simulating 2D von Karman vortex street, simulation of fluid flow inside complex three-dimensional porous structures and comparison between simulation and experimental values of intrinsic permeability for Berea and other petroleum reservoir sandstone

¹ Luis Orlando Emerich dos Santos has a BS degree in Electrical Engineering and a MSc degree in Physics. He is presently making his Doctoral studies in Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT) which include the use of lattice gas automata (LGA) for the analysis of single and two-phase flow displacements in 3D porous representations.

² Paulo C. Philippi is Professor at Federal University of Santa Catarina where he heads the Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT). He specializes in image analysis and processing, single and multiphase flow in porous media and lattice gas automata (LGA) methods.

* Corresponding Author (philippi@lmpt.ufsc.br)

³ Marcos Cabral Damiani is a software development engineer from the Engineering Simulation and Scientific Software (ESSS) staff. Presently, he is working in the software development of Imago at Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT).

1. Introduction

Although computer non-expensive, considering processing operations and resident memory requirements, lattice gas cellular automata (LGA) have intrinsic fluctuations related to the use of boolean variables and is not suitable for describing hydrodynamics, excepting in the limit of incompressible, low Reynolds number flows[1]. In fact, the equilibrium distribution for the expected values of the boolean variables, used in these models, is a Fermi-Dirac[2],[3] distribution, producing non-physical effects for intermediates and large Reynolds number.

Lattice Boltzmann method (LB) was originated from the ensemble average of LGA microscopic dynamic equation[5][6]. In this aspect:

- i) it is based on regular discrete lattices, maintaining propagation and collision steps,
- ii) it works with real variables instead of boolean variables, which are interpreted as the probability $N_i(\mathbf{X}, T)$ of finding a particle in the direction i of a given lattice site \mathbf{X} , at time T .

The main feature of Boltzmann method, distinguishing this method from a method based on statistical ensemble averages of boolean models, is that the collision term is written to give the expected macroscopic behavior. In this sense, LB method can be seen as a common numerical method, based on relaxation equations, written to reproduce the hydrodynamic behavior of the flow problem we want to solve.

In this way LB method is not limited to low Reynolds number flows, being suitable to the study of flow problems where inertial effects are important. In fact, it has been used in the last decade in the study of instable flows with periodic fluctuations (von Karman vortex street).

In present work, LB method is presented and applied to the study of fluid flow simulation through porous structures of complex geometry. Simulation results are presented and compared with experimental values in the prediction of intrinsic permeability of Brazilian Sandstones.

2 - Model

Microscopic Dynamics

Three-dimensional physical space is considered to be a cubic lattice where each site \mathbf{X} has b_m neighbors (figure 1). Each site is characterized by a particle distribution function $N_i(\mathbf{X}, T)$ which evolves according to the Lattice Boltzmann Equation:

$$N_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) - N_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T) = \Omega_i,$$

(1)

where T is the time variable, the index i indicates the neighbor, \mathbf{c}_i is a velocity vector pointing to neighbor i ($i=0$ refers to the rest particle distribution). The term in the right side is called collision term and is written in such way that

$$\sum_{i=0}^{b_m} \Omega_i = 0,$$

(2)

$$\sum_{i=0}^{b_m} \Omega_i \mathbf{c}_i = 0,$$

(3)

in order to preserve the mass and momentum of each site.

The evolution of the model, given by equation (1), can be split in two processes. In the first, designated as *collision*, the distribution function $N_i(\mathbf{X}, T)$ is changed by the action of the collision operator. In the second process, called *propagation*, the values N_i are propagated to the neighbor sites, in accordance with the direction of the vector \mathbf{c}_i .

The mass and momentum variables are defined with the help of the distribution function:

$$\sum_{i=1}^{b_m} N_i + N_0 = \rho, \quad (4)$$

$$\sum_{i=0}^{b_m} N_i \mathbf{c}_i = \rho \mathbf{u}. \quad (5)$$

The BGK Collision Term

In present paper a single-time-relaxation approximation for the collision is used (BGK model[6])

$$\Omega_i = \frac{(N_i^{eq} - N_i)}{\tau}, \quad (6)$$

where τ is the relaxation time and N_i^{eq} , the equilibrium distribution, is determined in order to obtain the desired macroscopic equations. The rate of change toward the equilibrium distribution is imposed to produce the viscosity of the fluid, which is the only macroscopic property related to collisions in single-fluid flows.

Equilibrium distributions

When equilibrium is reached collision process should not affect the particle distribution. Therefore, the equilibrium distributions N_i^{eq} must be specified by the collisional invariants (ρ, \underline{u}) . To the case of small \mathbf{u} , it can be written:

$$N_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = A_i + B_{i\alpha} \mathbf{u}_\alpha + D_{i\alpha\beta} \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\beta \quad i=1, 2, \dots, b_m \quad (7)$$

where b_m indicates the number of directions of the lattice.

There are some conditions that must be imposed to N_i^{eq} in order to determine A_i , $B_{i\alpha}$ and $D_{i\alpha\beta}$. First, it is imposed that any transformation that preserves the lattice and direction i must not affect the equilibrium distribution. Hence it can be saw that

$$A_i = A \quad (\text{remember that when } |\mathbf{u}| = 0, N_i^{eq} \text{ must be symmetric})$$

$$B_{i\alpha} = B \mathbf{c}_{i\alpha}$$

$$D_{i\alpha\beta} = D_1 \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\beta + D_2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (8)$$

Rest particles equilibrium distributions must be independent of the direction \mathbf{i} , and can be write,

$$N_0^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = b_r A + D_3 \delta_{\alpha\beta}, \quad (10)$$

where b_r reeffers to the number of rest particles being a free parameter.

Obviously, the distributions N_i^{eq} and N_0^{eq} must be in accordance with equations (4) and (5):

$$\sum_{i=1}^{b_m} N_i^{eq} + N_0 = \rho, \quad (11)$$

$$\sum_{i=0}^{b_m} N_i^{eq} \mathbf{c}_i = \rho \mathbf{u}. \quad (12)$$

These constraints allow to determine A , B and D_3 . Remained parameters D_1 and D_2 are chosen in order to obtain macroscopic hydrodynamic equations, avoiding non-physical lattice gas effects such as:

- i) a velocity dependent pressure ,
- ii) breaking of galilean invariance.

The equilibrium distribution for the rest particles is, finally, given by

$$N_0^{eq} = \rho \left(\frac{b_r}{b_r + b_m} \right) - \frac{\rho}{2} (\mathbf{u})^2, \quad (13)$$

and for moving particles along the main axes

$$N_i^{eq} = \rho \left(\frac{1}{br + bm} \right) + \rho \left(\frac{2}{b_m} \right) \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} + \rho \left(\frac{3}{b_m} \right) (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \rho \left(\frac{1}{b_m} \right) (\mathbf{u})^2, \quad (14)$$

and for particles moving along the diagonals ($|\mathbf{c}_i| = \sqrt{2}$), N_i^{eq} is given by

$$N_i^{eq} = \frac{\rho}{2} \left(\frac{1}{br + bm} \right) + \frac{\rho}{2} \left(\frac{2}{b_m} \right) \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{\rho}{2} \left(\frac{3}{b_m} \right) (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{\rho}{2} \left(\frac{1}{b_m} \right) (\mathbf{u})^2. \quad (15)$$

Scaling to physical variables

Using h and ε as, respectively, a spatial and a time scale

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= h\mathbf{X} \\ t &= \delta T \end{aligned} \quad (16)$$

\mathbf{x} and t may be considered as physical variables, varying continuously in the spatial and time domain of the physical system to be described, when h and δ are small.

Hydrodynamic LB equations

Using Chapman-Enskog method in the Lattice-Boltzmann equation, in the limit of low Knudsen number $Kn = h/L = \delta/\Gamma \ll 1$, where L is a characteristic length and Γ is a characteristic time and neglecting terms beyond second order, leads to

$$\partial_t(\rho) + \partial_\beta(\rho u_\beta) = 0 \quad (17)$$

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha(p) + v\partial_\beta[\partial_\beta(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha(\rho u_\beta)] \quad (18)$$

where the pressure p and the kinematic viscosity v are given by

$$p = \frac{1}{3} \rho$$

(19)

$$v = \frac{1}{6} (2\tau - 1).$$

(20)

The mass balance equation is, exactly, the same equation obtained in classical hydrodynamics. Considering low Mach number (ρ constant), the obtained momentum balance equation will be, clearly, in agreement with the Navier-Stokes equation.

Boundary conditions

The non-slip condition near the walls can be easily obtained imposing the bouncing-back boundary condition, i. e., all particle that would hit the walls in the propagation step reverses its direction in this step. There are other (and more precise) ways to ensure non-slip condition[7], but the bouncing-back boundary condition was chosen due to its simplicity.

In the simulations periodic boundary conditions were always used. To simulate flows through porous media it was added a non-solid region in the inlet and outlet, and flow was forced adding some amount of momentum at each site of this region, according to the equation

$$N_i(X + \mathbf{c}_i, T + 1) - N_i(X + \mathbf{c}_i, T) = \Omega_i + \mathbf{f} \cdot \mathbf{c}_i$$

(21)

where \mathbf{f} indicates the direction of the force applied and is proportional to its magnitude.

3. Results

Poiseuille flow

A simulation was performed for the flow between two parallel plates in order to compare the results obtained using the Lattice-Boltzmann method and results predicted using the Navier-Stokes equations. As can be seen in figure 2 the simulated points fits exactly in a parabolic profile.

Two-dimensional flows

Several simulations of flows past circular cylinder were done. In figure 3 is shown the simulated flow and a photograph (from Batchelor[8]), the similarity of the images is great. In figure 4 is presented three stages in the development of flow past circular cylinder, revealing the formation of the von Karman's vortex street. A flow through a simplified 2D porous media is presented in figure 5.

Intrinsic permeability

Three-dimensional representations of the porous structure, reconstructed from petrographic thin plates by using Liang *et al.* method[9][10] were used to calculate intrinsic permeability of several sandstones. Information about this reconstruction method can be found in a companion paper submitted to present meeting[11].

Table I gives some simulation results and comparison with experimental data for sandstones. The sampling factor n appearing in the table is an important reconstruction parameter. Sampling factor $n=1$ means that three-dimensional representation and the binary image have the same spatial resolution. As sampling factor n increases, resolution decays with the same ratio. In general, it is very difficult to preserve original resolution in reconstructed representations, due to limitations inherent to the reconstruction method itself, which fails in

preserving the fine details of the porous structure. In this sense, the best-reconstructed microstructure is considered to be the one generated with the sampling factor that gave the best agreement between pore size distributions, measured on the original binary image and on cross-sections of the three-dimensional representation. The size of the reconstructed structure is another important parameter. The size must be sufficient to ensure statistical homogeneity with respect to fluid flow problem[12]. Structures of 100^3 , 120^3 and 150^3 were used to perform the simulations presented.

4 – Conclusions

In this work the Lattice Boltzmann is presented as tool for doing hydrodynamic simulations, especially when inertial terms are important. Several results are showed: simulations of two-dimensional flows and calculation of intrinsic permeability for several sandstones, in this case is important to mention that the results of intrinsic obtained by Lattice gas models[13] are better than the ones presented here. We suppose these results could be better if it was increased the image sizes used, but computational requirements rapidly limit this option.

Acknowledgements

The authors would like to acknowledge CENPES/PETROBRAS (Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo A. Miguez de Mello) for providing the images and experimental data for Berea and Brazilian sandstones and the financial support of CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), PADCT (Programa de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico), RHAE (Programa de Formação de Recursos Humanos em Áreas Estratégicas) and FINEP (Financiadora de Estudos e projetos).

References

- [1] – Rothman, D. H., Zaleski, S. (1997). *Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics* (Cambridge University Press).
- [2] – Frisch, U., Hasslacher B., Pomeau Y. (1986). “Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation” *Physical Review Letters* **56**, 1505-1508.
- [3] – Frisch, U., d’Humières, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau, Y., Rivet, J. (1987). “Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions” *Complex Systems* **1**, 649-707.
- [4] - McNamara G. G. and Zanetti G. (1988). “Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata” *Physical Review Letters* **61**, 2332-2335.
- [5] – Higera, F. and Jimenez, J. (1989). “Boltzmann approach to lattice gas simulations.” *Europhys. Lett.* **9**, 663-668.
- [6] – Qian, Y. H., d’Humières D., Lallemand P. (1992) “Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation” *Europhys. Lett.* **17**, 479-484.
- [7] – Zou, Q. and He, X. (1997) “On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model” *Phys. Fluids* **9**, 1591-1598.
- [8] – Batchelor, G. K. (1967) *Fluid Dynamics* (Cambridge University Press).
- [9] – Liang, Z.R.. “Computer Generation and Application of 3-D Reconstructed Porous Structures: From 2-D Images to the Prediction of Permeability” Doctoral Thesis, Depto de Eng. Mecânica, UFSC, 1997.
- [10] – Liang, Z. R., Fernandes, C. P., Magnani, F. S. and Philippi, P. C. (1998) “A Reconstruction Technique of 3-D Porous Media by using Image Analysis and Using Fourier Transform”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **21**, 3-4, 273-283.
- [11] – Damiani, M. C., Fernandes, C. P., Bueno, A. D., Santos, L. O. E., da Cunha Neto, J. A. B. and Philippi, P. C. “Predicting Physical Properties of Reservoir Rocks from the Microstructural Analysis of Petrographic Thin Sections”. Submitted to Produccion 2000 / Aplicaciones de la ciencia en la ingeniería de petróleo, **May 08-12 /2000, Foz de Iguaçu**
- [12] – van Genabeek, O. and Rothman, D. H. (1996) “Macroscopic Manifestations of Microscopic Flows Through Porous Media: Phenomenology from Simulation” *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.* **24**, 63-87.
- [13] –Santos, L. O. E., Philippi P. C. and Damiani, M. C. “Simulation of fluid flow inside porous structures by using lattice boltzmann model”. Submitted to Produccion 2000 / Aplicaciones de la ciencia en la ingeniería de petróleo, **May 08-12 /2000, Foz de Iguaçu**

Figures and Tables

| Sandstone sample | Experimental Permeability | Recontruted Image Size | Sampling Factor | Simulated Permeability |
|------------------|---------------------------|------------------------|-----------------|------------------------|
| 67409 | 441 | 100 | 5 | 743 |
| 67409 | 441 | 150 | 5 | 709 |
| L2861 | 114 | 100 | 6 | 493 |
| L2861 | 114 | 150 | 6 | 499 |
| 51440 | 316 | 100 | 5 | 458 |
| 51440 | 316 | 150 | 5 | 350 |
| Berea | 200 | 100 | 5 | 355 |
| Berea | 500 | 120 | 5 | 637 |

Table 1 – Intrinsic permeability results.

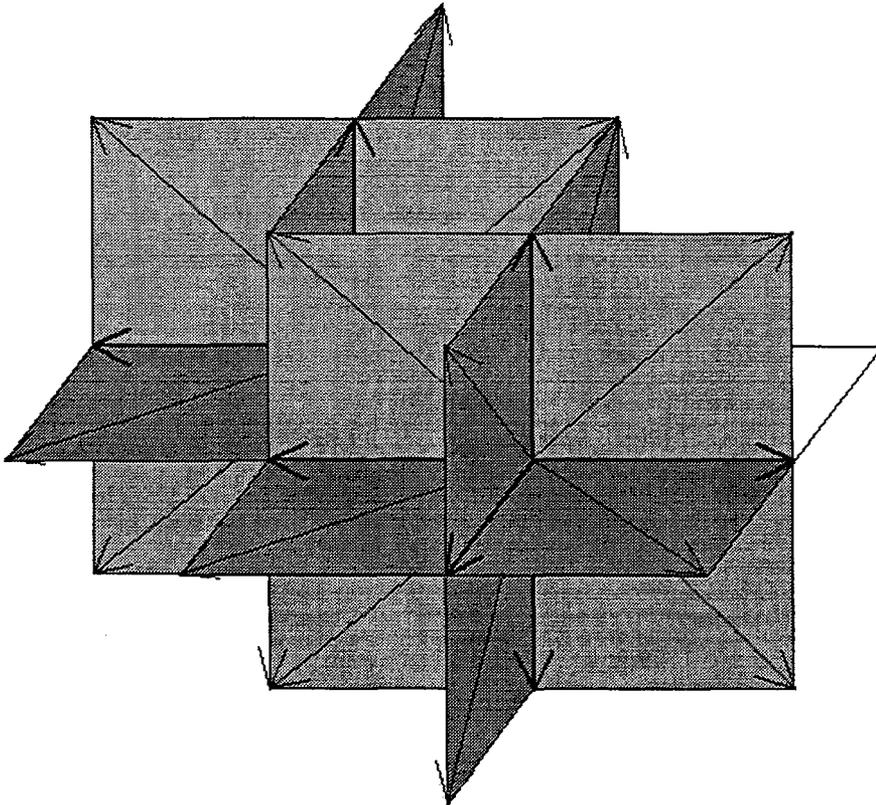


Figure 1. – Three dimensional lattice with 18 velocities.

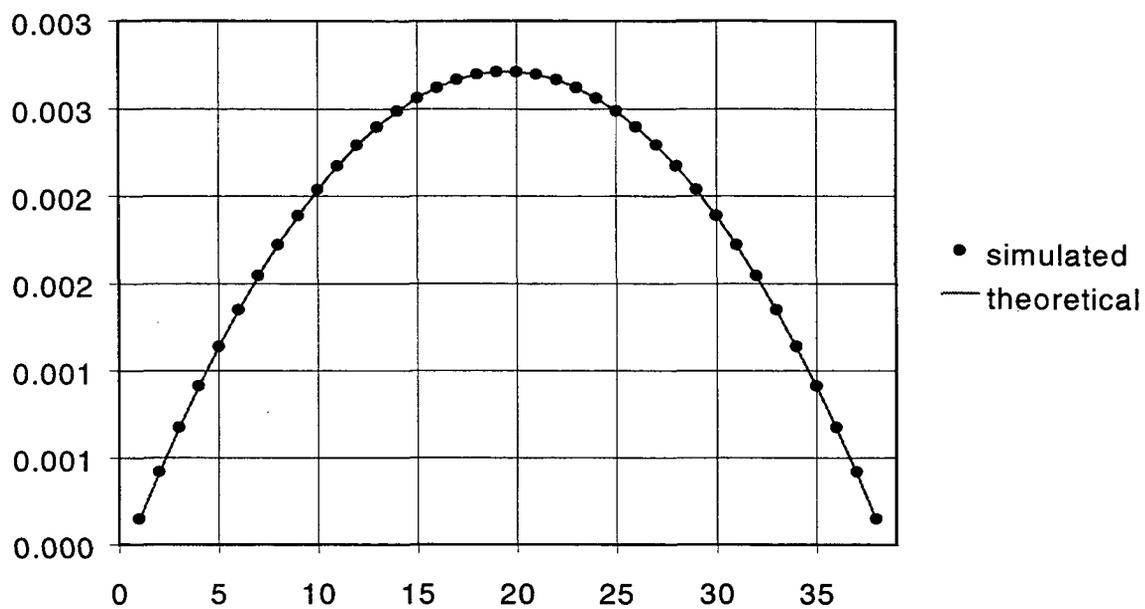


Figure 2. Velocity profile of a flow between two parallel plates. The simulation was done using a lattice of 40 sites in the direction perpendicular of flow. Periodic conditions were also used.

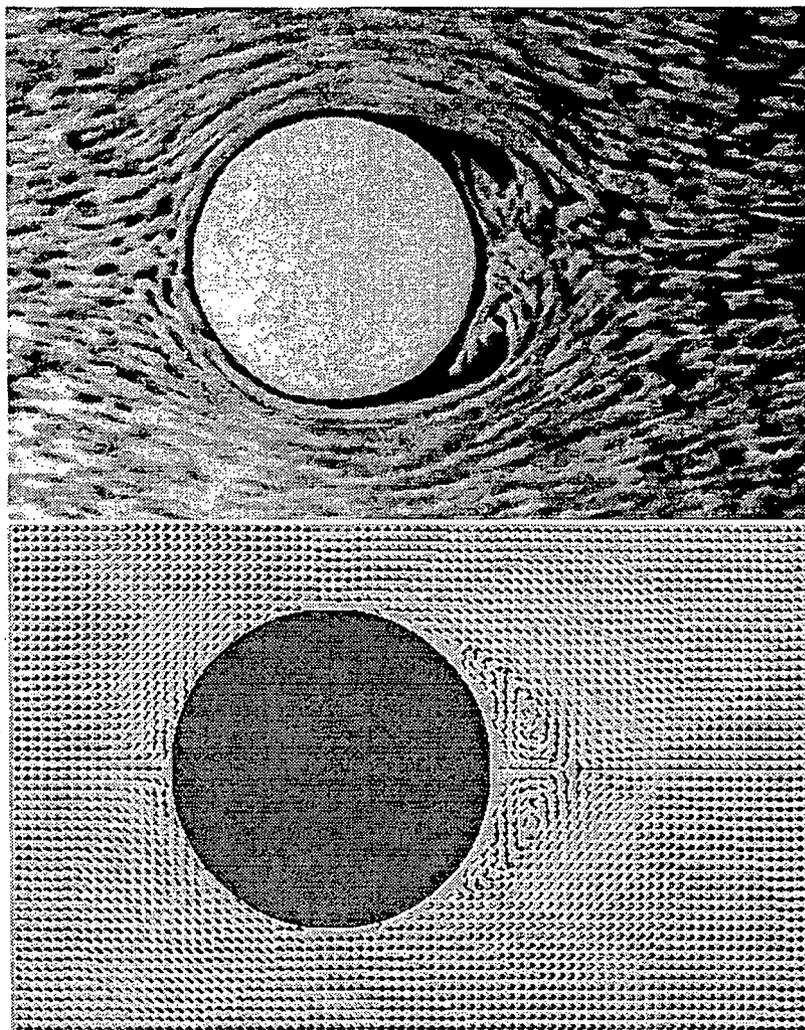


Figure 3 Simulation of a flow past a circular cylinder and a photograph of such flow.

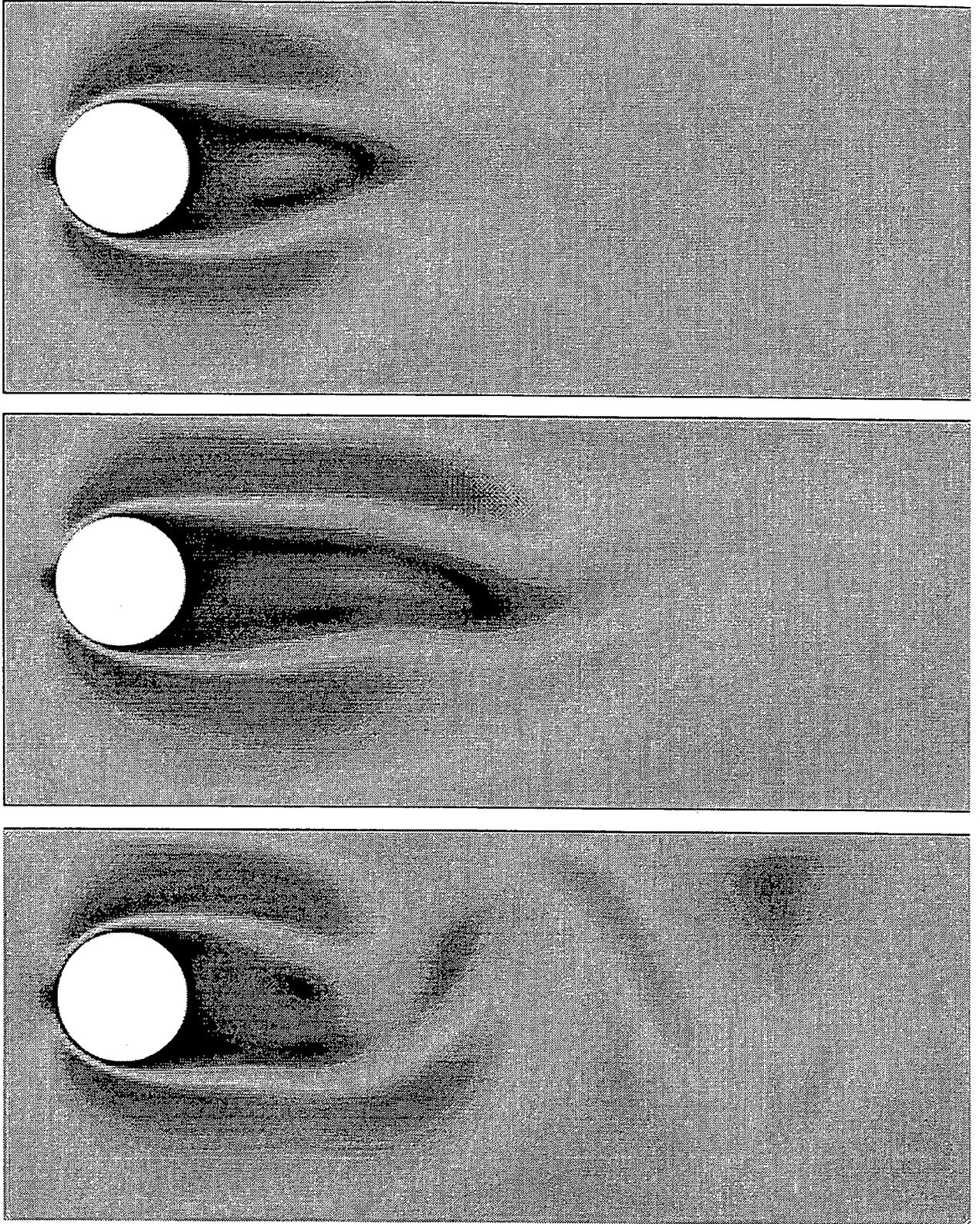


Figure 4. Three stages in the simulation of flow past a circular cilinder.

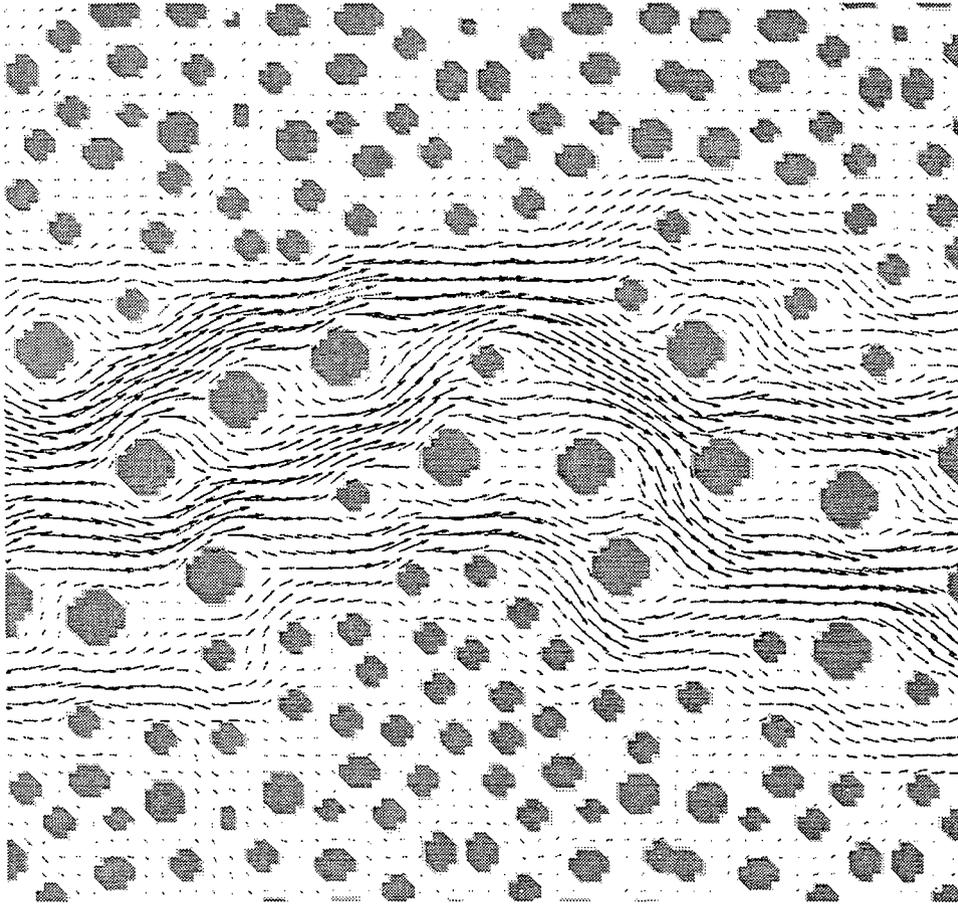


Figure 5. Velocity field of a through a 2D porous media.

Apêndice D

LGFLOW: A NUMERICAL WATER-TABLE FOR FLUID FLOW VISUALIZATION BASED ON LATTICE-GAS AUTOMATA.

(artigo a ser apresentado no congresso **ENCIT 2000 - CONGRESSO BRASILEIRO
DE ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS** - Outubro de 2000)

LGFLOW: A NUMERICAL WATER-TABLE FOR FLUID FLOW VISUALIZATION BASED ON LATTICE-GAS AUTOMATA.

N. R. M. Brasiliense^{*}, rogerio@lmpt.ufsc.br
 M.C. Damiani⁺, damiani@lmpt.ufsc.br
 L.O. Emerich dos Santos^{*}, emerich@lmpt.ufsc.br
 P.C. Philippi^{*+}, philippi@lmpt.ufsc.br

(*) Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory (LMPT).
 Mechanical Engineering Department. Federal University of Santa Catarina BP476
 88040-900 Florianópolis, SC, Brazil.

(+) Engineering Simulation and Scientific Software (ESSS)
 Parque Tecnológico de Florianópolis - Rodovia SC 401 km 001
 88030-000 - Florianópolis - Santa Catarina - Brasil

Abstract. The present paper describes LGFlow, a two-dimensional interactive numerical *water table* for fluid flow visualization, developed for educational purposes and based on lattice gas models. Lattice gas models are relatively recent and were developed to perform hydrodynamic calculations, being object of considerably interest in the last years. Two models are used, the Boolean model and the Boltzmann model. In its simplest form, Boolean model consists of a regular lattice populated with particles that hop from site to site in discrete time steps in a process, often, called *propagation*. After propagation, particles in each site interact with each other in a process called *collision*, in which the number of particles and momentum are preserved. An exclusion principle is imposed in order to achieve better computational efficiency and a Boolean variable $n_i(r, t)$ is assigned to each direction in a site to indicate the presence ($n_i=1$) or absence ($n_i=0$) of a particle in that direction. Boltzmann model has the same principles but works with real variables related to the ensemble average values of $\langle n_i(r, t) \rangle$. Despite its simplicity, these models reproduce Navier-Stokes equation behavior for low Mach numbers. The present work deals with two-dimensional models based on a hexagonal lattice. Intended to be a *self-learning* tool in fluid-mechanics education, LGFlow received an attractive and *user-friendly* graphics interface based on Coi-lib[®] with an on-line visualization window for velocity and pressure fields and boundary conditions are easily managed from *form* windows. This work, some visualization examples are given of fluid flow around obstacles and inside constrictions and compared with available data found in fluid mechanics literature.

Keywords: lattice gases, flow, two-dimensional visualization

^{*} Corresponding author

1. INTRODUCTION

This paper presents LGFlow, a numerical *interactive* water table developed for education purposes in the learning of fluid mechanics and related disciplines.

LGFlow simulation algorithms are based on Lattice Gas Automata models (LGA).

In lattice gas automata models (LGA), fluid is supposed to be represented by a finite set particles. Each of these particles has a finite number of degrees of freedom and can move following only, the directions of a regular lattice, jumping from one lattice node (sites) to another in unitary time steps. Each lattice node is the site of a collision process between particles. In this way, their dynamical evolution is described following a sequence of unitary time steps. Each time step evolution is performed in accordance with a collision step followed by a propagation step.

Description of fluid flow by following the dynamical evolution of a finite set of material points in random motion, considering elastic collisions between these points, was achieved in the late XIX century by Maxwell and Boltzmann, founding the Kinetic Theory of Gases.

In kinetic theory, continuous variables are used for describing space, time and velocities. Broadwell (1964) was the first to use discrete variables, proposing a three-dimensional model with six directions following the orthogonal directions of a Cartesian frame, establishing the Discrete Kinetic Theory.

The first LGA model was introduced in the early seventies by Hardy, Pazzis e Pomeau (1973, 1976). In the first half of the eighties, several papers from Wolfram (1983, 1984) on cellular automata had a great influence on LGA development. A critical step was given by Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986). They suggested a hexagonal LGA model, further called FHP model.

LGA theoretical development was achieved by introducing *ensemble* averages over a set of LGA realizations. Chaos molecular hypothesis gives Boltzmann equation in discrete form, which has an H-theorem and a Fermi-Dirac distribution as equilibrium solution. Further, use of Chapman-Enskog method shows that FHP and several other LGA models are capable of retrieving hydrodynamic equations in the limit of low Reynolds and Mach numbers.

Boltzmann's equation describes *what is expected* to be the dynamical evolution of the particles distribution function $N_i(\mathbf{X}, T)$, related to direction i , lattice site \mathbf{X} and time T , when a *great* number of LGA realizations are considered.

Boltzmann's equation gave rise to another kind of lattice gas models, presently called Lattice Boltzmann Models (LB) which are based on the relaxation of N_i to an *equilibrium* distribution N_i^0 , written in the manner to retrieve hydrodynamics, without the intrinsic limitations of Fermi-Dirac based LGA older models.

An LB model based on a hexagonal plane lattice is used in LGFlow, for describing intermediate Reynolds number flows. Sample studies showed that LGFlow module based on LB model can be used up to $Re=1000$ in a Pentium-II, 124 Mb resident memory PC.

In the next, the basic fundamentals of lattice gas models are presented, followed by a brief presentation of LGFlow software and machine requirements. Finally, visualization results of using LGFlow as a numerical water table are presented and discussed.

2. LATTICE GAS FUNDAMENTALS

2.1 Kinetic Theory

Although kinetic theory dates from Bernoulli (1738), who tried to explain *elasticity* of gases considered them as a set of particles in random motion, its main development occurred in the second half of XIX century by Maxwell and Boltzmann. This was achieved by introducing *probability theory* in the study of N-body problem in classical Lagrangian mechanics.

In fact, no *general* solution exists for the N-body problem when N is larger than 2.

Considering a gas as a set of a *very large* number N of material points, with translational degrees of freedom, it is possible to use probability laws when considering

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$$

as a probability density function for the number of particles with velocities between \mathbf{c} and $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ found, at time t , inside an elementary volume $d\mathbf{r}$ of the physical space.

Considered as a continuous function, the velocity distribution function $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ is modified in the absence of external forces by the streaming of particles and by collisions in \mathbf{r}, \mathbf{c} space. Its evolution is given by Boltzmann's equation:

$$\partial_t f + \mathbf{c}_\alpha \partial_\alpha f = (\partial_t f)_{\text{coll}} \quad (1)$$

where ∂_t is a time derivative and ∂_α means a spatial derivative.

Boltzmann's equation has an H-theorem and an equilibrium solution, explaining irreversibility of macroscopic behavior as due to inter-particle collisions. In this way, collisions are considered to be the main mechanism responsible for dissipation phenomena in fluids.

In the early XX century, Chapman and Enskog, simultaneously, formally retrieved hydrodynamic transport equations from Boltzmann's equation, by considering the first statistical moments of the velocities distribution function (Chapman and Cowling, 1970):

$$\partial_t (\rho) + \partial_\beta (\rho v_\beta) = 0 \quad (2)$$

$$\partial_t (\rho v_\alpha) + \partial_\beta [\rho v_\alpha v_\beta] = -\partial_\alpha (\rho) + \partial_\beta \left\{ \mu [\partial_\beta (v_\alpha) + \partial_\alpha (v_\beta)] \right\} + \partial_\alpha \left\{ \kappa [\partial_\beta (v_\beta)] \right\} \quad (3)$$

where \mathbf{v} designates fluid velocity.

In the above equations:

- i) pressure p is directly related to mass density ρ by ideal gas law,
- ii) first, μ , and second, κ , viscosity coefficients are given in terms of the collision term in the Boltzmann's equation and related to ideal gas behavior.

These two above remarks are very important in the context of lattice gas development. In fact this means that: a) a set of particles follow ideal gas law, when *long-range* interaction are not considered b) hydrodynamic equations are *insensible* to the details of collision processes, which appear related, or to the transport coefficients themselves μ and κ .

The first observation is of no consequence in the low Mach number approximation incompressible flow.

The last observation was the basis for the development of LGA models.

2.2 Lattice Gas Automata Models: Microscopic dynamics

In LGA models (Fig. 1), particles are restricted to move along the directions of a *regular* lattice, jumping from one lattice site to another after unitary time steps. Lattice particles are *not to be considered* as gas molecules, but just as *model particles*, with the same *overall* statistical behavior of a large set of gas molecules. In this way lattice particles follow *mass* and *momentum* conservation in collisions at lattice sites. For each time step, the dynamic evolution of the model is, then, given in two steps. In the first step, designated as *collision step*, the state of site X is changed following collision rules conceived so as to preserve total mass and momentum of the site. In the second step, called *propagation step*, particles are propagated to the neighbor sites, in accordance with their direction at site X after collision step. In addition, an *exclusion* principle is used, avoiding two particles to be, simultaneously, at the same link between two sites, at the same time step. Due to the nature of LGA models, this restriction is not to be considered as a *physical* restriction, but a way for reducing computational requirements, enabling to work with Boolean variables.

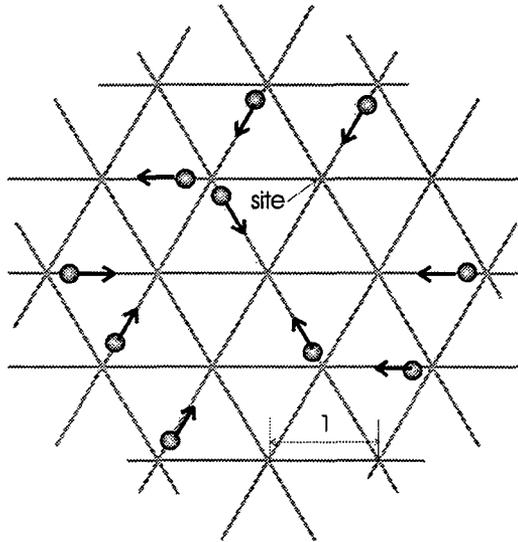


Figure 1. A hexagonal, two-dimensional lattice gas model.

Consider a regular lattice where each site \mathbf{X} has b_m neighbors. A Boolean variable $n_i(\mathbf{X}, T)$ is assigned to site \mathbf{X} to indicate the presence ($n_i=1$) or absence ($n_i=0$) of a particle in direction i at time T . Vector \mathbf{c}_i indicates the unitary velocity vector pointing in direction i . A finite, at most b_r , number of rest particles is allowed to populate site \mathbf{X} . Let $b = b_m + b_r$. Let S be the set of all possible states of a given lattice site. Obviously S has 2^b elements.

A given state s of S can be represented by the array:

$$s = (s_{o1}, \dots, s_{obr}, s_1, \dots, s_{bm}) \quad (4)$$

where the first b_r bits indicate rest particles and the following b_m bits indicate moving particles.

Microscopic evolution is described by the following equation:

$$n_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T+1) = n_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i(n_{o1}, \dots, n_{obr}, n_1, \dots, n_{bm}) \quad (5)$$

where $\omega_i: (n_{o1}, \dots, n_{obr}, n_1, \dots, n_{bm}) \rightarrow \{-1, 0, 1\}$ represents the collision operator which can take the values -1 , 1 or 0 , depending on the state $(n_{o1}, \dots, n_{obr}, n_1, \dots, n_{bm})$ of site \mathbf{X} , before the collision.

Considering $\alpha: S \times S \rightarrow [0, 1]$ to be the transition matrix (with $2^b \times 2^b$ elements), the collision term can be written as

$$\omega_i(n_{o1}, \dots, n_{obr}, n_1, \dots, n_{bm}) = \sum_s \left[\sum_{s'} \alpha(s, s') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b \delta(n_{j+i}, s_{j+i}) \right] \quad (6)$$

where s' designates post-collision states.

2.3 Ensemble averages. Macroscopic behavior of a LGA model.

Lattice-gas models have three description levels. In the more detailed level, $n_i(\mathbf{X}, T)$ are described for every \mathbf{X} and T . In general, this is too refined in the description of macroscopic phenomena. A less detailed description is given by furnishing the expected values $N_i = \langle n_i(\mathbf{X}, T) \rangle$, obtained as *ensemble* averages over a large number of realizations. In the third level, only the first moments of N_i are furnished for each \mathbf{X} and T . In fact, in the continuum limit, when Knudsen number is very small, it can be shown that the first moments of N_i are related between themselves through a closed system of equations, i.e., the hydrodynamic equations.

Classically, in the framework of *Fluid Mechanics*, we try to solve this closed system of equations and obtain numerical values for pressure and velocity fields. In LGA conception, expected values $N_i(\mathbf{X}, T)$ result from several Boolean realizations. Macroscopic equations are,

then, obtained from the first moments of N_i . What we are going to show, in the following, is that, under certain restrictions, these moments satisfy classical hydrodynamic equations.

$N_i(\mathbf{X}, T)$ is defined as the expected value of $n_i(\mathbf{X}, T)$, over an *ensemble* of realizations, run using randomly chosen initial conditions and satisfies.

$$N_i(\mathbf{X}+\mathbf{c}_i, T+1)=N_i(\mathbf{X}, T) + \Omega_i(N_{o1}, \dots, N_{obr}, N_1, \dots, N_{bm}) \quad (7)$$

which is the Boltzmann's equation for the lattice, in discrete form. Taking molecular chaos hypothesis into account, the collision term can be written as:

$$\Omega_i(N_{o1}, \dots, N_{obr}, N_1, \dots, N_{bm}) = \langle \omega_i(n_{o1}, \dots, n_{obr}, n_1, \dots, n_{bm}) \rangle = \sum_s \left[\sum_{s'} A(s, s') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} \right] \quad (8)$$

It may be show that, as a consequence of *exclusion principle*, this equation has a Fermi-Dirac distribution as equilibrium solution.

2.4 LGA Hydrodynamic Equations.

The first two moments of distribution function N_i are:

$$\sum_i N_i = \rho \quad (9)$$

$$\frac{1}{\rho} \sum_i N_i c_i = \mathbf{u} \quad (10)$$

where $\rho = \rho(\mathbf{X}, T)$ is the total number of particles and $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{X}, T)$ is the macroscopic velocity in site \mathbf{X} , at time T , in *lattice units*.

Using Chapman-Enskog method, a closed system of equations is obtained relating these two first moments, in the limit of low Reynolds number and Mach number $M \ll 1$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (11)$$

$$\rho \partial_t (v_\alpha) = -\partial_\alpha (p) + \rho v \partial_\beta \partial_\beta v_\alpha \quad (12)$$

where $\mathbf{v} = (h/\delta)\mathbf{u}$, h is a space scale and δ is a time scale, converting lattice to physical variables

For high Reynolds number, *non-physical* lattice effects are present in the hydrodynamic equations. These effects are to be attributed to the nature of Fermi-Dirac equilibrium distribution, associated with exclusion principle.

2.5 Lattice Boltzmann Model.

Lattice Boltzmann models are based on relaxation equations for the velocities distribution function. The most common are written as:

$$N_i(\mathbf{X}+\mathbf{c}_i, T+1) - N_i(\mathbf{X}, T) = \frac{N_i(\mathbf{X}, T) - N_i^o(\mathbf{X}, T)}{\tau} \quad (13)$$

where τ is a relaxation time, in lattice units.

Equilibrium distribution, N_i^o , is written in the manner so as to retrieve hydrodynamic equations in the form

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (14)$$

$$\partial_t (v_\alpha) + \partial_\beta [v_\alpha v_\beta] = -\frac{1}{\rho} \partial_\alpha (p) + v \partial_\beta [\partial_\beta (u_\alpha)] \quad (15)$$

describing incompressible flow, without the limitations of Boolean models and able to describe high Reynolds number flows.

3. FLOW SIMULATION IN LGFlow

3.1 Simulation Grid

LGFlow has a small grid editor (Fig. 2) and is able to open black and white bitmaps, where velocity is to be calculated at the grid points in the flow region.

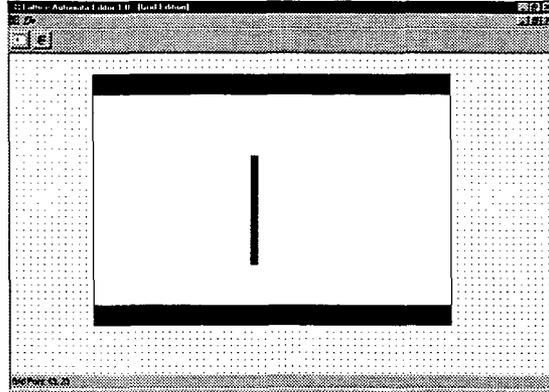


Figure 2. LGFlow grid editor.

B&W bitmaps are usually codified as rectangular arrays of black and white pixels. LGFlow uses a hexagonal plane lattice, where each site has 6 neighbors. This is performed in accordance with Fig. 3 showing how LGFlow establish a 6-neighboring relation on a rectangular grid.

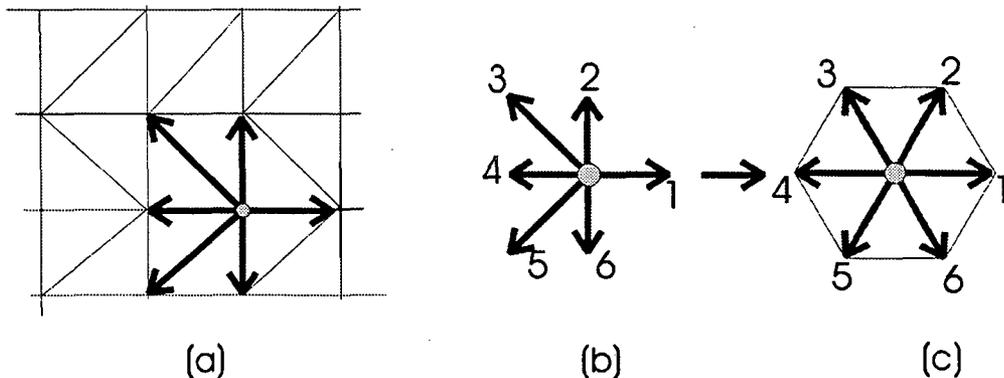


Figure 3 (a) Establishing a 6-neighboring relation on a rectangular grid. (b) Sites 1-6 are considered to be the 6 next neighbors of the central site 0. (c) Macroscopic velocity is calculated at central site by using the hexagonal configuration.

3.2 Boolean Model.

Evolution equation, Eq. (5), is the basic algorithm used by LGFlow for simulating flow. At time $t=0$, lattice particles are randomly distributed on the lattice sites. For each pre-collision configuration s , post-collision configuration s' is randomly chosen between those states s' with the same mass and momentum. This is performed by using a transition table located in computer resident memory and constructed, previously to simulation, following the particular LGA model used. LGFlow is based on a hexagonal lattice with $b_m=6$ and $b_r=1$; collisions exclude pre-collision state when transition is possible. This model is called FHP collision full-saturated model due to Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986). In propagation step, each particle at direction i is propagated to the neighbor site $\mathbf{X} + \mathbf{c}_i$.

At solid boundaries, particles that reached boundary sites are bounced back in the same direction, at the next time step. This is the, frequently used, *bouncing-back* condition, avoiding flow slipping at the boundary, and assuring the limiting condition $\mathbf{u}=\mathbf{0}$.

In simulating incompressible flows, considering the state equation relating pressure to mass density, pressure gradients can, only, be promoted, associated to density gradients, which must, in turn, remain small. This problem is eschewed in conventional simulation by using Navier-Stokes *low Mach number approximation*. Nevertheless, in LGA simulation, flow is the result of billiard balls collisions and incompressibility can only be assured by working with small $|\mathbf{u}|$ meaning small $M=\mathbf{u}/c_s$, where c_s is the speed of sound in *lattice units*. It can be show that $c_s=0.65$, in present Boolean model. In this way, in LGA simulation a pressure gradient can only be created associated to a density gradient, which must be small, assuring $M \ll 1$ and avoiding compressibility effects.

For simulating flow, LGFlow Boolean module uses periodic conditions and a *pumping zone* at the beginning of the water-table. Periodic conditions assure that particles that escape from the end of the *water-table* are re-introduced at its beginning. In *pumping zone*, momentum is added to the particles, forcing them to the flow domain. In this way, LGFlow tries to mimic the real conditions related to a *real* hydraulic closed looping.

3.3 Boltzmann Model

LB model simulation is very easy to carry out. Initial conditions are source data and given in terms of ρ and components x and y of velocity \mathbf{u} for each site \mathbf{X} . Equilibrium distribution $N_i^o(\mathbf{X}, T)$ is, then, calculated, for each site \mathbf{X} . Boundary sites are considered to have an equilibrium distribution $N_i^o(\rho, \mathbf{u})$, given in terms of the specified velocity \mathbf{u} at the boundaries. In the following steps, relaxation equation, Eq. (13), is, successively, used to calculate N_i . At each step, velocity is calculated using Eq.(10), giving the flow field and enabling visualization at LGFlow simulation window.

4. RESULTS

4.1 Boolean Model. Fig. 4 presents a partial view of the main flow visualization window of LGFlow, showing the simulation results of a plane Poiseuille flow, using a *Boolean model*. Physical domain had 20X80 points and simulation took about 5 minutes in a Pentium II, 400 MHz computer, after 10^5 steps. Although representing a very simple flow problem, Poiseuille flow has been used for validation purposes. Simulation was performed with $Re=5$ and $M=0.09$.

Boolean models are most appropriate to simulate *low Reynolds number flows* and were successfully used by present authors to simulate fluid flow through porous structures, in the prediction of intrinsic permeability of petroleum reservoir rocks. In these cases $Re \sim 1$ (Santos *et al.*, 2000a,b). Results confirmed the reliability of Boolean method for calculating intrinsic permeability, for five different Brazilian sandstones. Fig. 5 presents a sample visualization of velocity field inside a two-dimensional porous structure, obtained by LGFlow. Pumping zone is 10 lattice units large, where a particle going to the left has a probability $p=0.08$ to be turned back to the right. Probability p corresponds to *pump strength* and will be responsible for accelerating the fluid toward the porous structure. Figure also shows two free flow zones, assuring flow uniformity, at the entry and rear faces of the porous structure.

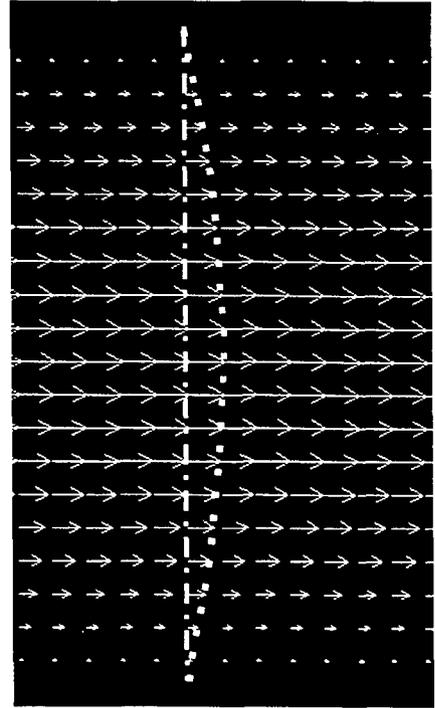


Figure 4 Partial view of LGFlow visualization window, showing a plane Poiseuille flow

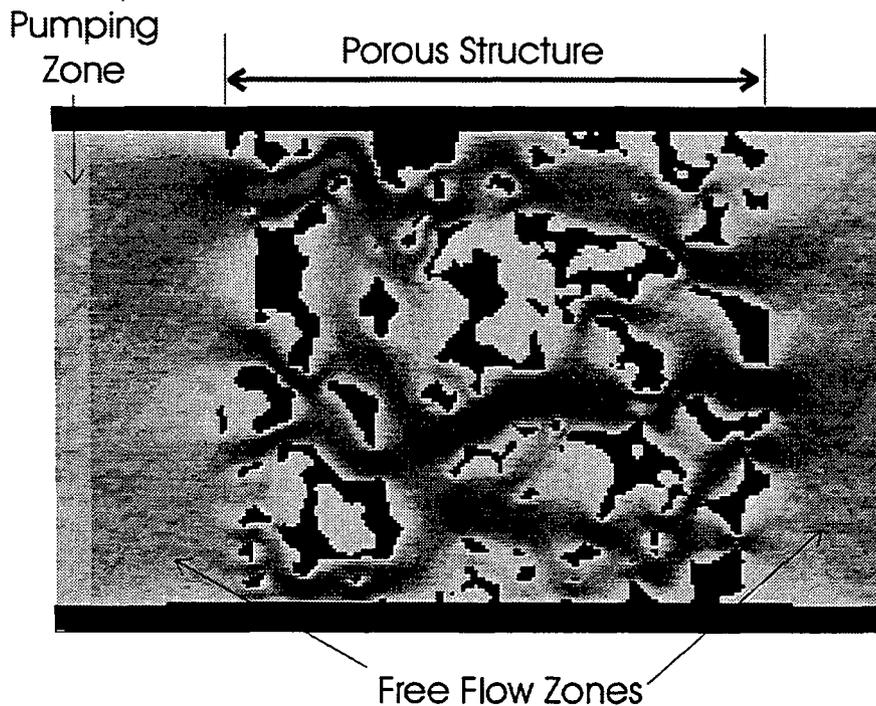


Figure 5. LGFlow simulation through a porous structure using Boolean model.

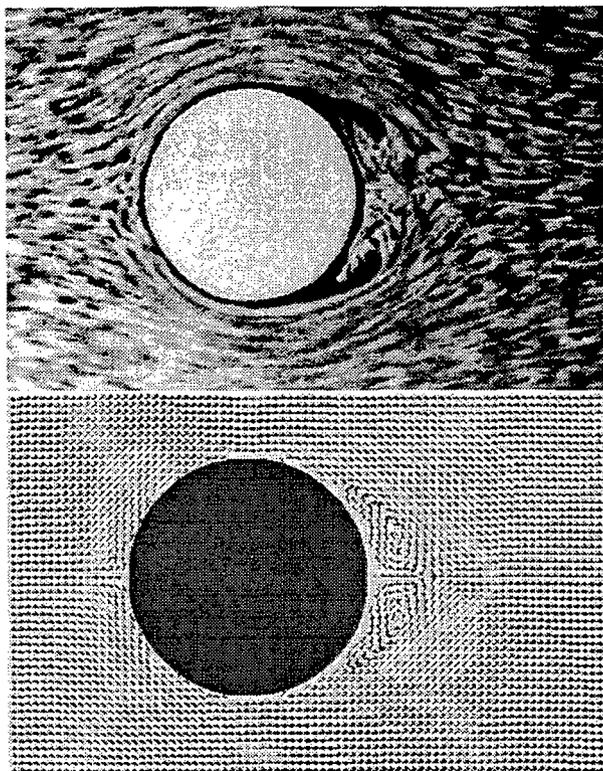


Figure 6. Flow past a circular cylinder. $Re=70$. Comparison with a flow visualization taken from Batchelor (1970)

4.2 Boltzmann Model. Fig. 6 shows simulation results using LB model for the flow past a circular cylinder at $Re=70$. Simulation starts by supposing fluid at rest at $t=0$ and by imposing a constant velocity to the right at all four boundaries. Results are related to the first 1000 simulation steps and simulation is compared to a flow visualization taken from Batchelor (1970). Both simulation and visualization show two vortices with opposed rotations, behind the cylinder, created as a result of boundary layer separation. These two vortices grow, moving downstream and asymmetry-generated instability degenerates the flow field to periodic waves, behind the cylinder (von Karman vortices).

This is shown in Fig. 7 for flow past a rectangular plate.

Considering flow against obstacles and inside constrictions LGFlow simulation results have been *qualitatively* compared with experimental visualization and numerical results, for several Reynolds number.

In addition, although partially, LGFlow has been validated against analytical and finite volume methods and by comparison with experimental data for several problems, including flow inside lit-driven cavities. In this sense, Fig. 8 shows the *real* transition when fluid starts from rest attaining stationary state, when the plate closing a fluid cavity starts moving to the right at constant speed (Ghia, 1982). Simulation was performed for Re between 100 and 3200, giving excellent agreement with numerical results obtained by using finite volume methods. Figure 9 shows a comparison between simulation and Ghia's results for $Re=1000$.

5. CONCLUSIONS

Present paper describes the main models and algorithms used in LGFlow, conceived to be an interactive numerical water table for educational purposes.

In this way, LGFlow received an attractive and *user-friendly* graphics interface with on-line visualization windows for velocity and pressure fields. Boundary conditions are easily managed from *form* windows. LGFlow is, thus, easily managed by undergraduate and graduate students in the learning of fluid mechanics and related disciplines.

In addition, although based on a very simple hexagonal lattice, validation results, apparently, confirm the reliability of LGFlow to be used in simulating two dimensional flows.

Acknowledgements The authors would like to acknowledge Luiz A. Hegele Jr. and Paulo Cesar Facin for validation work in the cavity problem. Authors gratefully acknowledge financial support of CNPq and Finep/CTPETRO.

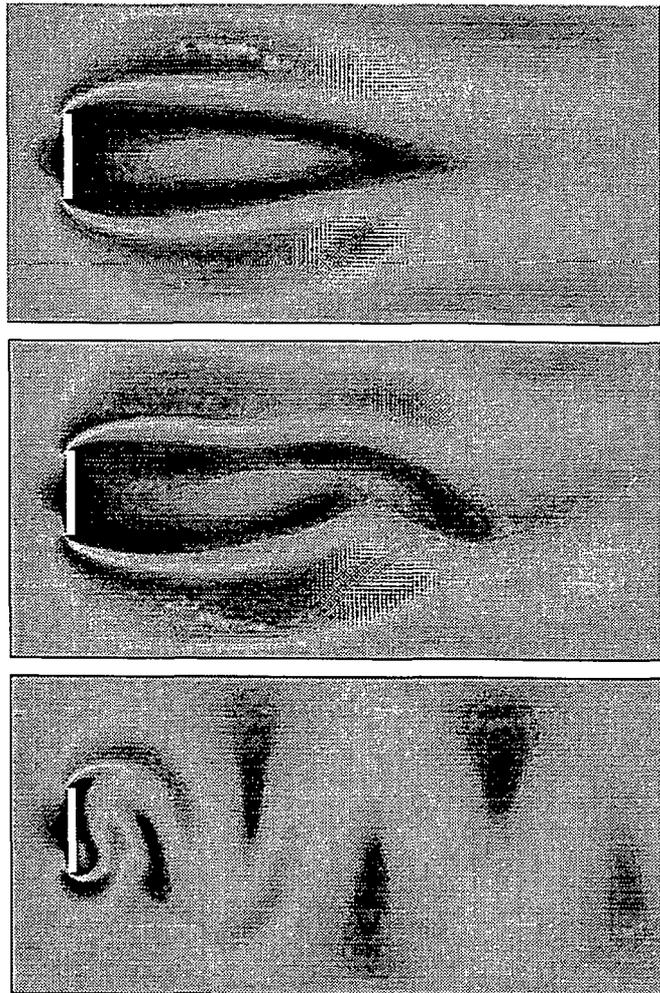


Figure 7. von Karman vortices: speed fields for 2000, 4000 and 15000 time steps ($Re=467$)

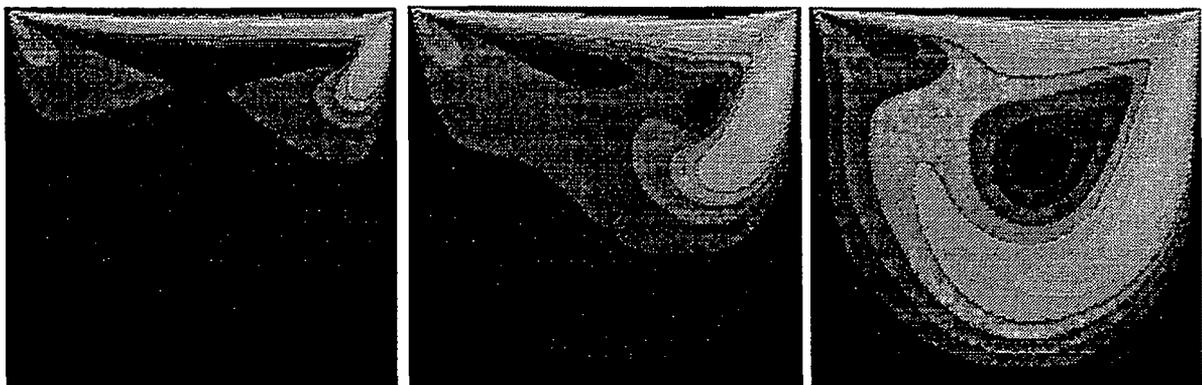


Figure 8. Lid -driven cavity: LB simulation starts from the rest to stationary state. Flow domain: 155×155 . Figure shows speed fields for 2000, 6000 and 25000 time steps ($Re=400$, $M=0.09$).

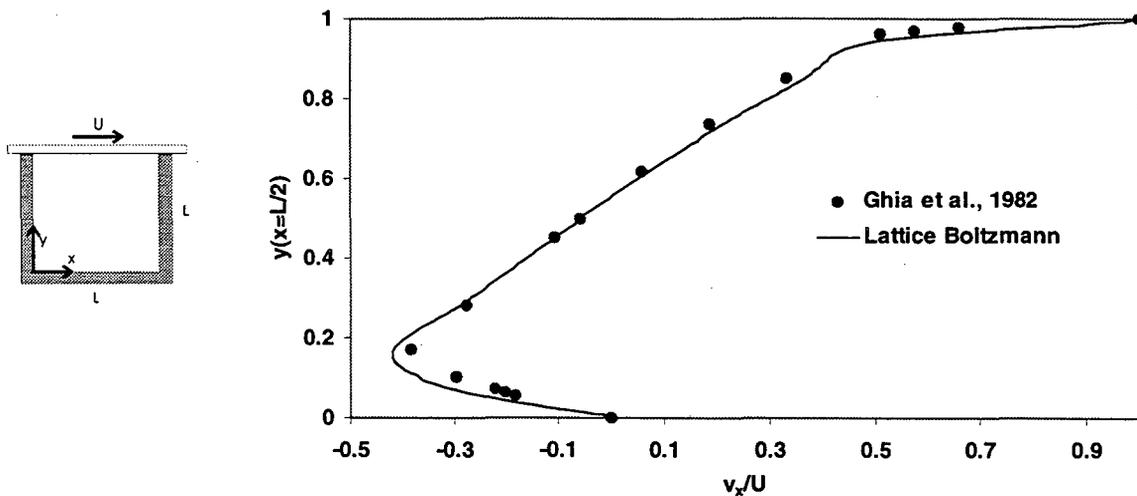


Figure 9 Velocity v_x (y) at $x=L/2$ for $Re=1000$, after flow attains stationary state.

References

- Bernoulli, D., 1738, *Hydrodynamica*, Argentoria, cited in Jeans, J. (1925) *Dynamical Theory of Gases*, 4th Edition, Dover, New York.
- Broadwell, I. E., 1964, Shock structure in a simple discrete velocity gas, *Phys. Fluids* 7, 1243.
- Batchelor, G.K., 1970, *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Chapman, S. and Cowling, T.G., 1970, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Frisch, U.; Hasslacher B.; Pomeau Y., 1986, Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation, *Physical Review Letters* 56, 1505-1508.
- Frisch, U., d'Humières, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau, Y., Rivet, J., 1987, Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions, *Complex Systems* 1, 649-707.
- Ghia, U. Ghia, K.N. and Shin C. T., 1982, High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a multigrid Method *Journal of Computational Physics*, 48, 387-411
- Hardy, J., Pomeau, Y., Pazzis O., 1973, Time Evolution of a Two-Dimensional Model System. I. Invariant States and Time Correlation Functions, *J. Math. Phys.* 14, 1746-1759.
- Hardy, J., de Pazzis O.; Pomeau Y., 1976. Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions, *Phys. Rev. A* 13, 1949-1961.
- Santos, L.O.E., Philippi, P.C. and Damiani, M.C., 2000(a), A Boolean Lattice Gas Method for Predicting Intrinsic Permeability of Porous Media, *Produccion 2000 / Aplicaciones de la Ciencia en la Ingeniería de Petróleo*, May, 08-12 /2000, Foz de Iguazu.
- Santos, L.O.E., Philippi, P.C. and Damiani, M.C., 2000(b), Lattice Gas Methods for Predicting Intrinsic Permeability of Porous Media. submitted to ENCIT 2000, October, 03-06 /2000, Foz de Iguazu.
- Wolfram, S., 1983, Statistical Mechanics of Cellular Automata, *Reviews of Modern Physics* 55, 601-644.

Wolfram, S., 1984, Cellular automata as models of complexity, *Nature* 311, 419.